

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

ÉCOLE DOCTORALE DE PHYSIQUE ET CHIMIE PHYSIQUE

INSTITUT PLURIDISCIPLINAIRE HUBERT CURIEN

UMR 7178 CNRS/IN2P3

THÈSE présentée par

David ROUVEL

soutenue publiquement le jeudi 11 septembre 2014

pour obtenir le grade de Docteur de l'Université de Strasbourg

discipline : physique

spécialité : physique nucléaire théorique

n° d'ordre : 2469

Essai sur les symétries géométriques et les transitions de
forme du noyau de l'atome

Thèse dirigée par

Monsieur Jerzy DUDEK, professeur, Université de Strasbourg

Rapporteurs :

Monsieur Jacek DOBACZEWSKI, professeur, Université de Varsovie

Monsieur Piet VAN ISACKER, directeur de recherches, Commissariat à l'Énergie Atomique, Grand Accélérateur National d'Ions Lourds

Autres membres du jury :

Madame Christelle ROY, directrice de recherches, Institut Pluridisciplinaire Hubert CURIEN

Monsieur Benoît GALL, professeur, Université de Strasbourg

Monsieur Andrzej GÓŹDŹ, professeur, Université Marie CURIE SKŁODOWSKA de Lublin

Table des matières

Remerciements	7
Prologue	9
Chapitre 1 Théorie microscopique du mouvement collectif nucléaire	11
1.1 Évolution temporelle du noyau : deux durées caractéristiques	11
1.2 Hypothèse adiabatique et conséquences mathématiques	13
1.3 Description de l'évolution temporelle	20
1.4 Le tenseur de masse	24
1.5 Discussion des nouveaux aspects concernant le tenseur de masse	32
Annexes du chapitre 1	37
A₁ Résolution alternative du système différentiel des coefficients C_k	39
B₁ Des coordonnées de forme complexes	41
Bibliographie du chapitre 1	43
Chapitre 2 Interactions et symétries géométriques du noyau de l'atome	45
2.1 La forme du noyau de l'atome	45
2.2 Le champ moyen	51
2.3 L'interaction électromagnétique	54
2.4 L'interaction nucléaire centrale	55
2.5 L'interaction spin-orbite nucléaire	56
2.6 Introduction des symétries	57
2.7 Plans de symétries et distance au noyau	61

2.8	Vers de nouvelles symétries	64
Annexes du chapitre 2		73
A ₂	Énergie d'un état dans le cadre du champ moyen	75
B ₂	Symétries et coordonnées de forme	79
C ₂	Invariance de la distance	83
D ₂	Invariance des dérivées de la distance	85
E ₂	Quelques tables de caractères	91
F ₂	Le cas du groupe de l'icosaèdre I _h	99
Bibliographie du chapitre 2		103
Chapitre 3 Le tenseur de masse nucléaire		105
3.1	Prise en compte de l'appariement	105
3.2	Recombinaison des protons et des neutrons	110
3.3	Réalisation du tenseur de masse dans le cadre du champ moyen et de l'appariement monopolaire et uniforme	111
Annexes du chapitre 3		129
A ₃	Énergie d'un état en présence de l'appariement	131
B ₃	Le vide de quasiparticules	135
C ₃	Un résultat intermédiaire pour le calcul de $\langle \Psi_{\nu,\kappa} \sum \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(\mathbf{q}) \Phi_k(\mathbf{q}) \rangle$	139
D ₃	Le théorème de HELLMANN-FEYNMAN-EPSTEIN	143
Bibliographie du chapitre 3		145
Chapitre 4 Expression des symétries de haut rang dans quelques situations concrètes		147
4.1	Le nucléide ²⁵⁶ Rf et la déformation icosaédrique	148

4.2	L'apparition des gaps tétraédriques	155
4.3	La part du champ moyen et celle de l'appariement dans le tenseur de masse	159
4.4	Préparation à l'analyse des résultats sur le tenseur de masse	163
4.5	Les composantes du tenseur de masse	166
4.6	L'énergie potentielle collective et la densité de métrique : influence de la tempore risatrice	170
Bibliographie du chapitre 4		175
Chapitre 5 La mécanique analytique au service de la physique nucléaire		177
5.1	Du principe de moindre action	177
5.2	Des grandeurs intrinsèques dans l'espace	180
5.3	Des espaces métriques	184
5.4	De la mécanique dans un espace de RIEMANN	189
5.5	Contraintes physiques sur les mathématiques	195
5.6	De LAGRANGE à HAMILTON	198
5.7	L'équation de HAMILTON-JACOBI	201
Annexes du chapitre 5		203
A₅ Réellification d'une variété complexe		205
B₅ Connexion dans l'espace et dérivée covariante		207
C₅ Métrique de l'espace et dérivée covariante		213
Bibliographie du chapitre 5		222
Chapitre 6 L'équation de SCHRÖDINGER collective		223
6.1	Les ondes dans l'extension en configuration	223
6.2	La mécanique ondulatoire	227
6.3	Les règles de quantification	233
6.4	La densité de probabilité et la réalisation d'une observable	235
6.5	Établissement de l'équation de SCHRÖDINGER collective	235
6.6	Résolution de l'équation de SCHRÖDINGER collective	239

Annexes du chapitre 6	243
A ₆ Les équations de SCHRÖDINGER dont la masse dépend de la position	245
B ₆ Cas d'une résolution exacte de l'équation de SCHRÖDINGER dont la masse dépend de la position	251
C ₆ Application de la mécanique quantique formulée dans les espaces de RIEMANN à l'atome de protium	257
Bibliographie du chapitre 6	261
Épilogue	263
Serment	265

À toi qui ne pourras jamais lire ces équations

Remerciements

Je remercie ma camarade de chant et amie Marion DUPARC et, mon collègue et ami, Frédéric CUVELLIER pour leur relecture et leurs conseils avisés.

Pour leur aide en mathématiques, je remercie mon ami Vincent VIGON et Charles BOUBEL de l'Institut de Recherche Mathématique Avancée de Strasbourg, et Stephan KLAUS du Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach.

J'ai, pendant la préparation de cette thèse, apprécié les discussions avec beaucoup de collègues et amis, et en particulier mon professeur de licence et mon ami Georges OBERLECHNER.

Je remercie les chefs d'établissements du Lycée KLÉBER à Strasbourg, en particulier Nancy OUDENOT et Richard WACH, et du Lycée ROOSEVELT à Reims, Sylve GAUTIER, pour leur soutien dans ma démarche et pour m'avoir accordé de travailler à mi-temps pour cette convenance personnelle.

Pour la fabrication du matériel nécessaire à une expérience de mécanique des fluides, je remercie les appuis techniques de Gérard GAUDIOT et Mathieu BRUCKER.

J'ai bénéficié de la grande vélocité de François SCHMIDT à dénicher de très anciens articles parus dans des revues parfois introuvables, je le remercie chaleureusement.

Je remercie l'équipe des enseignants du master physique subatomique et astroparticules, en particulier Jean-Pierre ENGEL, et son directeur, Abdel-Mjid NOURREDDINE.

Je remercie le comité de suivi des thèses et l'école doctorale.

Les équipes de physique nucléaire m'ont permis de trouver une place d'apprenti chercheur et de collaborateur en leur sein, en particulier Marc ROUSSEAU qui m'a permis de travailler sur un ordinateur performant, Hervé MOLIQUÉ et Johann BARTEL qui m'ont prêté leurs livres, et Benoît GALL qui m'a accordé bien de son temps et m'a souvent aidé avec sa grande sagacité. Qu'ils en soient vivement remerciés.

Je tiens à remercier tout particulièrement Jerzy DUDEK pour les connaissances importantes prodiguées à son élève, son encadrement, sa rigueur et ses conseils – que je n'ai pas toujours suivis – et son humour mordant.

Je remercie chaleureusement les membres du jury d'avoir accepté d'évaluer ma thèse.

J'ai bénéficié du soutien très précieux de ma famille et de mes amis dans cette recherche obstinée du sens. Qu'ils soient tous profondément remerciés.

Pour m'avoir accueilli durant les cinq années de ma thèse, je tiens à remercier de tout cœur l'Institut Pluridisciplinaire Hubert CURIEN et spécialement sa directrice, Christelle ROY.

« Il libro della natura è scritto nella lingua matematica. » †
Galileo GALILEI

Prologue

QUAND J'ÉTAIS un enfant et que je découvrais la musique, j'étais fasciné par la présence de la dissymétrie de la gamme au sein de la symétrie des instruments. Cette dissymétrie se manifeste physiquement sur le clavier du piano ou de l'orgue. Comment cela fait-il pour aller ensemble ? Il y a là, dans le jeu de la symétrie et de la dissymétrie, de la physique à comprendre.

Force est de constater que la nature arbore des comportements réguliers. Les symétries géométriques sont des signatures frappantes de cette régularité de la nature. En effet, elles signifient que les propriétés d'un objet ou d'un phénomène restent inchangées lors d'une modification géométrique telle qu'une rotation d'un angle bien déterminé autour d'un axe précis. La physique est précisément l'étude et la compréhension de ces règles pour expliquer le monde. Mais la physique n'est pas seulement factuelle, elle prévoit aussi des comportements inobservés à l'aide de sa compréhension élargie des règles. Pour arriver à cela, nous ne cherchons pas à comprendre l'intégralité des observations d'un seul coup. Nous savons d'ailleurs que les observations contiennent une certaine incertitude qui masque la complète vérité de la réalité. Nous idéalisons donc le phénomène que nous souhaitons expliquer et nous arrivons alors à plaquer des mathématiques sur cette idéalité. Cette démarche n'est pas propre au physicien théoricien. Le physicien expérimentateur la pratique tout autant. En effet, ce dernier ne peut mener à bien une expérience qu'à la condition de définir un protocole expérimental. Or, tout protocole expérimental suppose une idée du comportement de la nature dans l'expérience qui va être menée. Cette idée est déjà une théorie, même si l'expérience est très rudimentaire. Une fois que les mathématiques ont été plaquées sur la réalité, nous déroulons le tapis de la logique. Nous construisons la théorie avec ses principes, ses définitions, ses lemmes et ses théorèmes. C'est ainsi que nous comprenons et prévoyons les phénomènes. Les mathématiques constituent donc la sève de l'arbre de la connaissance dont la physique est le tronc. Mais quelle différence y a-t-il entre la physique et les mathématiques ? La différence réside essentiellement dans le statut de la vérité. Une théorie mathématique n'est ni vraie, ni fausse, elle est logique. Une théorie physique est toujours fausse mais elle cherche à se rapprocher de la vérité. Il est peu probable qu'un jour une théorie puisse décrire exactement la réalité et exprimer la vérité complète des phénomènes naturels. Mais si c'était le cas, nous serions bien en peine de le savoir et de démontrer que nous connaissons la vérité. Seul le fait que la théorie prévoirait toujours précisément ce que l'expérience obtiendrait serait un signe, mais non une démonstration. Par ailleurs, les mathématiques qui servent à exprimer la réalité physique dans une théorie ne sont pas elles-mêmes la vérité ou la réalité. Elles

†. « Le livre de la nature est écrit en langage mathématique. »

restent un plaquage que nous réalisons sur notre perception de la nature.

La physique nucléaire présente une grande diversité de phénomènes liée à la complexité des systèmes nucléaires constitués de nombreuses particules situées au cœur de l'atome. Ceci la rend très intéressante car l'activité d'idéalisation et de sélection des phénomènes à privilégier est vaste. Mais évidemment le prix à payer est aussi une compréhension unifiée assez faible. Les interactions à l'œuvre dans le noyau nous permettent de maintenir des notions de géométrie classique telles que la surface, le volume, la forme pour un objet qui n'en demeure pas moins quantique. Si nous pouvons parler de forme du noyau, alors nous pouvons nous interroger sur les symétries géométriques de cette forme et sur la dynamique de la forme elle-même à travers des changements importants lors de transitions. C'est pourquoi utiliser la loupe des symétries géométriques pour comprendre et prévoir certaines propriétés du noyau est une idée importante qu'il faut explorer avec toutes les possibilités qu'elle offre.

L'objectif de cette thèse est de construire des outils permettant une étude systématique des symétries géométriques du noyau de l'atome et de leur évolution lors de transitions de forme. Ces outils ont été développés sur le plan formel des idées et des équations sous le strict patronage de la logique. Ils ont aussi été développés sur le plan du calcul numérique avec l'écriture de deux programmes assurant les prédictions concrètes du modèle que nous avons choisi de plaquer sur la réalité des faits expérimentaux afin de sauver les apparences. Cette thèse est organisée en six chapitres auxquels des annexes se trouvent adjointes et qui représentent un peu moins de la moitié du texte. Le premier chapitre est consacré à la mise en place des idées principales, la séparation des mouvements individuels des nucléons et du mouvement collectif du noyau, l'introduction du tenseur de masse nucléaire traduisant l'inertie du mouvement collectif. Le deuxième chapitre explicite une méthode pour traiter les symétries géométriques dans le cas du noyau qui est un objet quantique. Il propose aussi d'étudier des symétries qui apparaissent plutôt exotiques en physique nucléaire. Le troisième chapitre explicite les idées précédentes dans un cadre d'interaction nucléaire bien précis, le champ moyen de type WOODS-SAXON déformé avec un appariement uniforme et monopolaire. Le quatrième chapitre expose des résultats très nouveaux. Le cinquième chapitre est très mathématique et sert à remettre en place le formalisme des espaces métriques au service de la mécanique quantique. Le sixième chapitre contient une partie historique sur la genèse de l'équation de SCHRÖDINGER afin de mettre en place les équations de la dynamique des symétries. Venez, nous commençons.

« Philosoper revient en somme à ceci, se comporter à l'égard de l'univers comme si rien n'allait de soi. »

Vladimir JANKÉLÉVITCH

Chapitre 1

Théorie microscopique du mouvement collectif nucléaire

NOUS ENTRONS de plain-pied dans la physique nucléaire. Le travail théorique qui commence ici doit se fonder sur une réalité expérimentale que nous nous efforçons de rappeler dans la première section. Nous constatons que le noyau de l'atome est le lieu de deux types de mouvement dont les échelles de durée sont très différentes. Cela permet de mettre en place l'approximation adiabatique dans la deuxième section. Les nucléons évoluent rapidement dans un champ qui évolue lui aussi mais lentement. L'approximation adiabatique consiste à considérer que ces deux évolutions peuvent être étudiées séparément. Nous adjoignons l'approximation du champ moyen à l'approximation adiabatique et nous développons les premières conséquences mathématiques de ces hypothèses physiques. La troisième section précise la manière que nous proposons d'utiliser pour réaliser la séparation des deux évolutions. Nous introduisons une durée intermédiaire comprise entre la durée caractéristique brève du mouvement des nucléons et celle plus longue de l'évolution collective. Nous proposons de définir les grandeurs collectives comme issues d'une moyenne des grandeurs instantanées sur cette durée intermédiaire. Dans la quatrième section, nous appliquons cette méthode pour définir les énergies cinétique et potentielle collectives. Nous aboutissons à une nouvelle expression du tenseur de masse qui traduit l'inertie du noyau face aux mouvements collectifs. Les premières conséquences salvatrices de cette nouvelle forme du tenseur de masse sont discutées dans la cinquième section.

1.1 Évolution temporelle du noyau : deux durées caractéristiques

DANS CE qui suit, nous nous reposons sur les faits expérimentaux qui établissent clairement l'existence d'une composition de mouvements nucléaires lents et rapides. À partir de l'énergie typique associée à chacun de ces deux types de mouvements, nous allons définir une durée caractéristique τ de chaque mouvement. Dans cette intention, nous utilisons la relation de Max

PLANCK liant l'énergie E d'un quanton et sa pulsation ω , relation que nous remettons en forme pour faire apparaître une durée

$$E = \hbar\omega = \frac{2\pi\hbar}{\tau}. \quad (1.1.1)$$

Nous en déduisons une manière de définir la durée caractéristique

$$\tau = \frac{2\pi\hbar}{E}. \quad (1.1.2)$$

Les mouvements lents correspondent aux vibrations de la surface nucléaire telles que les oscillations collectives de l'état fondamental. Les énergies des excitations de vibrations collectives sont typiquement de l'ordre de :

$$E_{\text{col}} \approx 0,5 \text{ MeV à } 2 \text{ MeV}, \quad (1.1.3)$$

que l'on peut associer à une durée caractéristique

$$\tau_{\text{col}} = \frac{2\pi\hbar}{E_{\text{col}}} \approx 2 \times 10^{-21} \text{ s à } 8 \times 10^{-21} \text{ s}. \quad (1.1.4)$$

Les mouvements rapides, quant à eux, sont associés aux mouvements individuels des nucléons et correspondent à des énergies moyennes bien plus élevées. Les mouvements individuels des nucléons se déroulent dans une énergie potentielle de champ moyen avec une profondeur caractéristique de l'ordre de -60 MeV . L'énergie cinétique moyenne d'un nucléon correspond aux niveaux médians dans le puits d'énergie potentielle, elle est donc autour de 30 MeV . Et pour les nucléons dont le niveau est proche du niveau de FERMI autour de -10 MeV , l'énergie cinétique est de l'ordre de 50 MeV . Ainsi pour fixer les idées nous prenons

$$E_{\text{ind}} \approx 30 \text{ MeV à } 50 \text{ MeV} \quad (1.1.5)$$

que l'on peut associer à une durée caractéristique

$$\tau_{\text{ind}} = \frac{2\pi\hbar}{E_{\text{ind}}} \approx 8,3 \times 10^{-23} \text{ s à } 14 \times 10^{-23} \text{ s}. \quad (1.1.6)$$

Nous sommes donc en mesure de comparer les durées caractéristiques et cela nous amène à remarquer que, durant une oscillation collective, il y a entre 10 et 100 révolutions individuelles

$$\tau_{\text{col}} = 10 \text{ à } 100 \times \tau_{\text{ind}}. \quad (1.1.7)$$

Nous pouvons alors considérer que les mouvements collectifs sont des processus adiabatiques¹

1. Le terme *adiabatique* est emprunté au langage de la thermodynamique où il signifie qu'une transformation d'un système se déroule sans chaleur Q et uniquement avec du travail W . La lenteur relative de la transformation n'est pas un critère d'adiabaticité. La thermodynamique utilise aussi la notion de transformation quasistatique c'est-à-dire une transformation suffisamment lente pour que les champs de pression, de température, etc., puissent s'adapter régulièrement afin de rester uniforme à chaque instant au sein du système. Ainsi il y a des transformations adiabatiques non quasistatiques mais aussi des transformations quasistatiques non adiabatiques et encore des transformations adiabatiques et quasistatiques. Cependant on considère souvent en thermodynamique que les échanges d'énergie par de la chaleur sont plus lents ou moins puissants que ceux par du travail, par exemple dans l'étude de la propagation du son dans un fluide. C'est dans ce sens que la mécanique quantique a emprunté le mot *adiabatique* alors qu'elle aurait dû employer le mot *quasistatique*.

vis-à-vis des mouvements individuels. Dans ce contexte, le hamiltonien² de l'ensemble des nucléons évolue continûment et lentement sous l'effet des mouvements collectifs. Le noyau, au commencement dans un état propre du hamiltonien initial, persiste par continuité dans un état propre correspondant du hamiltonien en évolution. Nous allons maintenant montrer comment appliquer cette approximation dite adiabatique et développer le formalisme attendant.

1.2 Hypothèse adiabatique et conséquences mathématiques

DANS LE développement qui vient, nous allons devoir distinguer trois hamiltoniens différents avec leurs propriétés et leurs formalismes respectifs. Tout d'abord le hamiltonien à A particules, $\hat{\mathcal{H}}$, qui décrit toutes les interactions du noyau en tant que collection de A nucléons. Ensuite le hamiltonien de champ moyen, \hat{H} , qui nous donne accès à une bonne approximation de la physique d'un nucléon pris dans le noyau. Et enfin le hamiltonien collectif, $\hat{\mathcal{H}}$, qui décrit la physique du noyau en tant que quanton unique que nous pourrions appeler « noyon ».

La compréhension complète du noyau ne peut être à strictement parler obtenue qu'avec le hamiltonien à A particules et la résolution de l'équation de SCHRÖDINGER associée. Cependant nous savons depuis les travaux de Henri POINCARÉ qu'une telle position est vouée à l'échec puisqu'un système à au moins trois corps n'est pas intégrable en général. En outre, nonobstant un travail intense en physique nucléaire, l'interaction nucléaire reste encore incomplètement connue. Nous pouvons néanmoins écrire cette équation de SCHRÖDINGER³ sans préciser la forme de ce hamiltonien à A particules :

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_A, t) |\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \quad \text{où} \quad \hat{x}_i \equiv \left\{ \hat{r}_i, \hat{p}_i, \hat{s}_i, \hat{\eta}_i \right\} \quad (1.2.2)$$

avec respectivement les opérateurs de position, d'impulsion, de spin et d'isospin⁴ du nucléon numéro i ⁵.

2. Le mot hamiltonien est issu du patronyme anglais HAMILTON. Par conséquent, d'après les règles données par l'Académie Française, le h doit être aspiré comme dans les mots harpe, hasard ou hameau, c'est-à-dire qu'il n'y a ni élision ni liaison contrairement au mot hameçon. Ainsi il faut écrire et dire « le hamiltonien » et ne pas utiliser un « l » apostrophe. De même pour « du hamiltonien », « au hamiltonien ». Il faut dire sans liaison « un hamiltonien », « les hamiltoniens », « des hamiltoniens », « aux hamiltoniens ».

3. Nous rappelons que l'équation de SCHRÖDINGER exprimée avec la fonction d'onde s'écrit

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_A, t) \Psi(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_A, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_A, t), \quad (1.2.1)$$

mais que la notation de DIRAC avec les kets regroupe toutes les représentations dont celle de la fonction d'onde et que le ket ne dépend plus des variables $\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_A$ mais uniquement du temps, ce qui justifie l'usage des d droits dans la dérivée.

4. Il est d'usage de noter l'isospin avec les lettres t ou T . Cependant ces lettres sont déjà utilisées abondamment pour le temps et l'énergie cinétique. C'est pourquoi nous utilisons la lettre η pour l'isospin.

5. Il faut prendre garde à ne pas confondre i et i . Le premier, écrit en italique, est une variable habituelle, et ici un indice, alors que le second, écrit en romain, est le nombre unité imaginaire tel que

$$i^2 = -1. \quad (1.2.3)$$

THÉORÈME 1 : THÉORÈME ADIABATIQUE [1], [2] (bibliographie p. 43)

Soit un système physique dont le hamiltonien subit une évolution infiniment lente et dont le spectre est discret. Si les valeurs propres restent distinctes les unes des autres lors de l'évolution, alors le système se trouvant dans un état propre du hamiltonien à un instant se tient à tout instant ultérieur dans l'état propre du hamiltonien à ce nouvel instant qui s'en déduit par continuité.

~~~~~

Comme nous l'avons déjà proposé à la section précédente, nous pouvons considérer que l'évolution collective agit comme une perturbation lente de l'évolution individuelle permettant d'appliquer le théorème adiabatique : c'est ce qu'on appelle l'approximation adiabatique. Dans cette intention, nous devons donner une expression du hamiltonien à  $A$  particules où doivent apparaître des paramètres évoluant lentement. Nous considérons l'approximation de champ moyen qui permet d'introduire aisément de tels paramètres. En effet, comme son nom l'indique, le champ moyen est une interaction moyenne<sup>6</sup> dans l'espace entre un nucléon et tous les autres nucléons. Le grand nombre de nucléons autorise, à l'instar de l'hypothèse ergodique<sup>7</sup> en physique statistique, à estimer que les paramètres du champ moyen sont aussi des moyennes sur les mouvements rapides et constituent ainsi les premières grandeurs collectives. En outre, l'expérience montre le rôle important de l'appariement des nucléons dans le noyau, et nous en tenons compte en ajoutant un terme supplémentaire au champ moyen.

**PROPOSITION 1 : APPROXIMATION DU CHAMP MOYEN**

Le hamiltonien à  $A$  particules est la somme des hamiltoniens  $\hat{H}_n$  à une particule de champ moyen de chaque nucléon

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{n=1}^A \hat{H}_n \quad (1.2.5)$$

dont nous proposerons une forme ultérieurement. Ces hamiltoniens de champ moyen, chacun associé à un nucléon, dépendent de  $\hat{x}$  défini précédemment et du temps.

~~~~~

Nous introduisons maintenant les grandeurs collectives évoluant lentement dans le hamiltonien de champ moyen. Parmi ces grandeurs collectives, il y a en particulier les coordonnées de forme du noyau⁸. Pour le moment nous désignons ces grandeurs collectives par la notation q^i et q

6. Si nous considérons une interaction à deux corps dans le noyau, dont l'énergie potentielle entre le nucléon i et le nucléon j est $v_{ij}(\hat{x}_i, \hat{x}_j)$, alors l'énergie potentielle du champ moyen qui s'applique au nucléon j est

$$V_j(\hat{x}_j) = \frac{1}{A-1} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^A \int dx_i \psi_i^* v_{ij}(\hat{x}_i, \hat{x}_j) \psi_i. \quad (1.2.4)$$

7. L'hypothèse ergodique s'applique à un système contenant un grand nombre de particules, et consiste à supposer que, à l'équilibre, la valeur moyenne d'une grandeur calculée sur ensemble statistique est égale à la valeur moyenne au cours du temps.

8. Les coordonnées de forme, notées $\alpha_{\lambda\mu}$, sont introduites lors du développement de la forme de la surface du noyau de l'atome sur la base des harmoniques sphériques $Y_{\lambda\mu}$. Elles ont deux indices comme les harmoniques

../..

représente l'ensemble de ces coordonnées collectives à l'instar d'un vecteur.

PROPOSITION 2 : APPROXIMATION ADIABATIQUE

Le hamiltonien de champ moyen ne dépend pas explicitement du temps, mais il évolue avec les grandeurs collectives q^i qui dépendent explicitement du temps

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{x}; q) \quad \text{avec} \quad q = q(t) = \{q^i(t), 1 \leq i \leq d\} \quad (1.2.7)$$

et cette évolution du hamiltonien de champ moyen est adiabatique vis-à-vis de l'évolution propre du nucléon dans le champ moyen. ~~~~~

L'hypothèse du champ moyen alliée à l'hypothèse de grandeurs collectives évoluant lentement permet de passer d'un hamiltonien à A particules qui dépend explicitement du temps à un hamiltonien à A particules qui dépend implicitement du temps à travers une dépendance explicite vis-à-vis des grandeurs collectives

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_A, t) \rightarrow \hat{\mathcal{H}}(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_A; q) \quad \text{avec} \quad q = q(t) \quad (1.2.8)$$

et nous simplifions la notation

$$\hat{x} = \{\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_A\}. \quad (1.2.9)$$

L'équation de SCHRÖDINGER à A particules devient

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{x}; q) |\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \quad \text{avec} \quad q = q(t). \quad (1.2.10)$$

Dans cette équation, il faut noter que la dépendance temporelle explicite de l'état $|\Psi\rangle$ n'a pas été remplacée par une dépendance temporelle implicite à travers une dépendance explicite vis-à-vis des grandeurs collectives q . Nous allons procéder autrement pour l'état $|\Psi(t)\rangle$ en remarquant que puisque le hamiltonien ne dépend plus explicitement du temps, le théorème adiabatique nous permet d'écrire une équation de SCHRÖDINGER stationnaire instantanée avec le même hamiltonien

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{x}; q) |\Psi_k(q)\rangle = \mathcal{E}_k(q) |\Psi_k(q)\rangle \quad \text{avec} \quad q = q(t). \quad (1.2.11)$$

En effet, le théorème adiabatique signifie que lors d'une évolution adiabatique, si le système est dans un état propre, il évolue en persistant dans cet état propre qui se modifie lui-même au cours de l'évolution. Nous disons qu'il s'agit d'une coévolution. Ainsi cette équation dépend certes du

sphériques. Ce sont des tenseurs sphériques contravariants alors que les harmoniques sphériques sont des tenseurs sphériques covariants. Le premier indice est toujours en position inférieure et indique le rang du tenseur sphérique. Le second indique la composante du tenseur, et sa position inférieure ou supérieure précise la nature de la variance. La surface nucléaire est décrite par la distance R entre l'origine du repère et le point de la surface dans la direction repérée par le couple d'angle (θ, φ)

$$R(\theta, \varphi; \alpha) \propto 1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda}^{\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) \quad \text{avec} \quad \alpha \equiv \{\alpha_{\lambda}^{\mu}\} \quad (1.2.6)$$

Nous allons revenir en détail au chapitre 2 p. 45 sur l'utilisation de ce développement. Pour le moment, nous remplaçons α_{λ}^{μ} par q^i . Nous passons d'une indexation double à une indexation simple en définissant une bijection entre les deux indexations telle que l'ordre lexicographique. L'indice simple est en position supérieure afin de rappeler que les coordonnées collectives sont de nature contravariante.

temps mais elle ne permet plus de décrire l'évolution du système puisqu'elle ne contient plus la dérivée de la fonction d'onde par rapport au temps. L'équation qui vient d'être écrite est une équation stationnaire mais d'instant en instant, chaque instant séparément de tout autre. Le temps n'y joue que le rôle très passif d'une simple étiquette. La causalité est cependant maintenue par l'équation dépendante du temps portant sur un état dépendant explicitement du temps. Ainsi l'état du système à la date $t + dt$ se trouve bien causalement déterminé par l'état du système à la date t . Les solutions de cette équation stationnaire instantanée sont obtenues en résolvant l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire de champ moyen

$$\hat{H}(\hat{x}; q) |\psi_\kappa(q)\rangle = e_\kappa(q) |\psi_\kappa(q)\rangle \quad \text{avec} \quad q = q(t), \quad (1.2.12)$$

puis nous reconstruisons la fonction d'onde à A nucléons par exemple comme un déterminant de SLATER, ce qui est l'objet du chapitre 3 p. 105. Nous utilisons la faveur d'avoir simultanément les deux formes d'équations de SCHRÖDINGER pour exprimer un état dépendant explicitement du temps comme une superposition d'états stationnaires instantanés

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k^{\text{N}} C_k(t) |\Psi_k(q)\rangle e^{i\varphi_k(t)} \quad \text{avec} \quad q = q(t), \quad (1.2.13)$$

avec la phase définie en prolongeant la situation exactement stationnaire à la situation adiabatique

$$\dot{\varphi}_k(t) = -\frac{\mathcal{E}_k(q)}{\hbar} \quad \text{avec} \quad q = q(t). \quad (1.2.14)$$

Cela donne

$$\varphi_k(t) = \int_{t_0}^t dt' \dot{\varphi}_k(t') = -\frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{E}_k[q(t')], \quad (1.2.15)$$

puis arguant de la lente dépendance de q vis-à-vis du temps

$$\mathcal{E}_k[q(t)] \approx \mathcal{E}_k[q(t_0)] = \mathcal{E}_k(q) \quad \text{pour} \quad t - t_0 \ll \tau_{\text{col}}, \quad (1.2.16)$$

d'où

$$\varphi_k(t) \approx -\frac{\mathcal{E}_k(q)}{\hbar} (t - t_0) \quad \text{avec} \quad q = q(t). \quad (1.2.17)$$

L'instant t_0 est l'instant initial choisi par nous pour décrire l'évolution. Ce choix est arbitraire mais non subjectif. Il ne doit avoir aucune conséquence dans la suite.

Maintenant il ne nous reste apparemment plus qu'à déterminer les coefficients $C_k(t)$ pour connaître toute l'histoire du noyau. Par conséquent nous devons mettre en place le système d'équations différentielles qui régissent les coefficients $C_k(t)$ puis le résoudre. Pour ce faire, nous utilisons l'équation de SCHRÖDINGER à A particules dépendante du temps et nous y injectons l'état $|\Psi(t)\rangle$ défini ci-dessus. Le membre de gauche de l'équation de SCHRÖDINGER nous donne

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle &= i\hbar \sum_k^{\text{N}} \dot{C}_k(t) e^{i\varphi_k(t)} |\Psi_k(q)\rangle + \sum_k^{\text{N}} C_k(t) \mathcal{E}_k(q) e^{i\varphi_k(t)} |\Psi_k(q)\rangle \\ &\quad + i\hbar \sum_k^{\text{N}} C_k(t) e^{i\varphi_k(t)} \sum_{n=1}^d \dot{q}^n \frac{\partial}{\partial q^n} |\Psi_k(q)\rangle \quad \text{avec} \quad q = q(t) \end{aligned} \quad (1.2.18)$$

où nous avons utilisé le fait que, p. 16,

$$(1.2.14) \quad \dot{\varphi}_k(t) = -\frac{\mathcal{E}_k(q)}{\hbar} \quad \text{avec} \quad q = q(t)$$

pour modifier le deuxième terme, et nous transformons la dérivée totale par rapport au temps dans le troisième terme avec la formule de dérivation⁹ des fonctions composées de Louis François Antoine ARBOGAST et du Bienheureux Francesco FAÀ DI BRUNO

$$\frac{d}{dt} |\Psi_k(q)\rangle = \sum_{n=1}^d \dot{q}^n \frac{\partial}{\partial q^n} |\Psi_k(q)\rangle \quad \text{avec} \quad q = q(t). \quad (1.2.21)$$

Quant au membre de droite de l'équation de SCHRÖDINGER à A particules, il devient

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{x}; q) |\Psi(t)\rangle = \sum_k^{\mathbb{N}} C_k(t) e^{i\varphi_k(t)} \mathcal{E}_k(q) |\Psi_k(q)\rangle. \quad (1.2.22)$$

L'égalité des deux membres nous conduit à

$$\sum_k^{\mathbb{N}} e^{i\varphi_k(t)} \left[\dot{C}_k(t) + C_k(t) \sum_{n=1}^d \dot{q}^n \frac{\partial}{\partial q^n} \right] |\Psi_k(q)\rangle = 0. \quad (1.2.23)$$

Nous effectuons alors le produit scalaire au sens de DIRAC entre cette dernière équation et l'état $e^{i\varphi_j(t)} |\Psi_j(q)\rangle$, ce qui nous amène à

$$\sum_k^{\mathbb{N}} e^{i[\varphi_k(t) - \varphi_j(t)]} \langle \Psi_j(q) | \dot{C}_k(t) + C_k(t) \sum_{n=1}^d \dot{q}^n \frac{\partial}{\partial q^n} |\Psi_k(q)\rangle = 0. \quad (1.2.24)$$

Nous posons

$$\varphi_{kj}(t) = \varphi_k(t) - \varphi_j(t) \approx \frac{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_k(q)}{\hbar} (t - t_0) = \Omega_{kj}(q) \times (t - t_0) \quad (1.2.25)$$

avec

$$\Omega_{kj}(q) = \frac{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_k(q)}{\hbar}. \quad (1.2.26)$$

En remarquant que les coefficients $C_k(t)$ sont des nombres qui commutent avec tout opérateur, nous en déduisons le système d'équations différentielles.

9. Dans le cas où $q \in \mathbb{C}^d$, il est impératif de considérer séparément la partie réelle et la partie imaginaire. Ainsi

$$|\Psi_k(q)\rangle \rightarrow |\Psi_k(\text{Re } q, \text{Im } q)\rangle \quad (1.2.19)$$

et

$$\frac{d}{dt} |\Psi_k(q)\rangle = \sum_{n=1}^d \text{Re } \dot{q}^n \frac{\partial}{\partial \text{Re } q^n} |\Psi_k(\text{Re } q, \text{Im } q)\rangle + \sum_{n=1}^d \text{Im } \dot{q}^n \frac{\partial}{\partial \text{Im } q^n} |\Psi_k(\text{Re } q, \text{Im } q)\rangle. \quad (1.2.20)$$

LEMME 1 :

Le système d'équations différentielles qui régit l'évolution de la fonction d'onde est

$$\dot{C}_j(t) = - \sum_{n=1}^d \dot{q}^n \sum_k^{\mathbb{N}} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_k(q) \rangle e^{i\varphi_{kj}(t)} C_k(t) \quad \text{avec } q = q(t). \quad (1.2.27)$$

Il ne reste plus qu'à résoudre ce système d'équations différentielles¹⁰. Mais dans ce système d'équations différentielles nous avons supposé, sans le dire, toutes les coordonnées collectives comme indépendantes. Néanmoins, dans le cas des coordonnées de forme, $q^n = \alpha_\lambda^\mu$, une telle supposition devient illicite. En effet, les coordonnées de forme constituent un ensemble de tenseurs sphériques. Subséquemment elles doivent respecter la contrainte liée à la convention de phase de CONDON-SHORTLEY

$$\alpha_\lambda^{-\mu} = (-1)^\mu (\alpha_\lambda^\mu)^* \quad (1.2.28)$$

et si les coordonnées de forme sont réelles¹¹, cette contrainte devient simplement et heureusement

$$\alpha_\lambda^{-\mu} = (-1)^\mu \alpha_\lambda^\mu. \quad (1.2.29)$$

Cette contrainte ne doit jamais être oubliée surtout dans le calcul de $\sum_{n=1}^d \dot{q}^n \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_k(q) \rangle$ qui est intervenu précédemment. Nous allons abandonner temporairement la notation q^n au profit de α_λ^μ afin d'écrire explicitement les conséquences mathématiques de la contrainte ci-dessus. Une fois le résultat obtenu nous allons le remettre en forme avec la notation q^n qui est plus générale. Ainsi

$$\sum_{n=1}^d \dot{q}^n \frac{\partial}{\partial q^n} \quad \text{devient} \quad \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \dot{\alpha}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu} \quad (1.2.30)$$

et nous séparons les coordonnées indépendantes des autres

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \dot{\alpha}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu} = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left[\sum_{\mu=1}^{\lambda} \dot{\alpha}_\lambda^{-\mu} \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^{-\mu}} + \dot{\alpha}_\lambda^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^0} + \sum_{\mu=1}^{\lambda} \dot{\alpha}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu} \right]. \quad (1.2.31)$$

Or, nous pouvons écrire du fait de l'existence de la contrainte que

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^{-\mu}} = \frac{\partial \alpha_\lambda^\nu}{\partial \alpha_\lambda^{-\mu}} \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\nu}, \quad (1.2.32)$$

et avec l'expression de la contrainte

$$\frac{\partial \alpha_\lambda^\nu}{\partial \alpha_\lambda^{-\mu}} = (-1)^\mu \delta_\mu^\nu \quad (1.2.33)$$

10. Il est possible d'envisager une autre méthode de résolution du système que celle qui va être employée dans la section 1.4 p. 24 et nous en exposons les grandes lignes à l'annexe A₁ p. 39.

11. *A priori* les coordonnées de forme sont des nombres complexes mais nous allons voir dans le prochain chapitre qu'en nous restreignant au cas déjà fort général de noyaux possédant le plan (zOx) comme plan de symétrie, les coordonnées de forme sont nécessairement réelles. Le cas des coordonnées de forme complexes est traité à l'annexe B₁ p. 41.

donc

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^{-\mu}} = (-1)^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu}. \quad (1.2.34)$$

Par ailleurs l'expression de la contrainte implique aussi que les vitesses de déformation sont liées

$$\dot{\alpha}_\lambda^{-\mu} = (-1)^\mu \dot{\alpha}_\lambda^\mu \quad (1.2.35)$$

et par conséquent

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \dot{\alpha}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu} = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left[\dot{\alpha}_\lambda^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^0} + \sum_{\mu=1}^{\lambda} 2\dot{\alpha}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu} \right] = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{\lambda} (2 - \delta_{\mu 0}) \dot{\alpha}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu}. \quad (1.2.36)$$

Nous pourrions nous arrêter ici mais la notation obtenue ne permet pas l'usage de la convention d'EINSTEIN. Aussi afin de pouvoir la rétablir, nous introduisons

$$\mathcal{D}_{\lambda\mu'}^{\lambda'\mu} = (2 - \delta_{\mu 0}) \delta_\lambda^{\lambda'} \delta_{\mu'}^\mu, \quad (1.2.37)$$

qui nous permet d'écrire¹²

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \dot{\alpha}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu} = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\lambda'=0}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{\lambda} \sum_{\mu'=0}^{\lambda'} (2 - \delta_{\mu' 0}) \delta_\lambda^{\lambda'} \delta_{\mu'}^\mu \dot{\alpha}_{\lambda'}^{\mu'} \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu} \quad (1.2.40)$$

$$= \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\lambda'=0}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{\lambda} \sum_{\mu'=0}^{\lambda'} \mathcal{D}_{\lambda\mu'}^{\lambda'\mu} \dot{\alpha}_{\lambda'}^{\mu'} \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu} \quad (1.2.41)$$

et nous voyons que nous pouvons rétablir une notation conforme à la convention d'EINSTEIN en gardant à l'esprit que les domaines de variation des indices sont modifiés

$$\dot{\alpha}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu} = \mathcal{D}_{\lambda\mu'}^{\lambda'\mu} \dot{\alpha}_{\lambda'}^{\mu'} \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu}. \quad (1.2.42)$$

La situation de la contrainte des coordonnées de forme se généralise à toute situation de liaisons scléronomes entre certaines coordonnées collectives. Nous pouvons maintenant reprendre les notations q^n et \dot{q}^n et désormais dans un soucis d'allègement de la notation, nous utilisons la convention d'EINSTEIN en nous souvenant bien que dans la notation q^n l'exposant n n'est pas une puissance mais un indice contravariant. Alors

$$\mathcal{D}_{\lambda\mu'}^{\lambda'\mu} \text{ devient } \mathcal{D}_m^n \quad (1.2.43)$$

et

$$\mathcal{D}_{\lambda\mu'}^{\lambda'\mu} \dot{\alpha}_{\lambda'}^{\mu'} \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu} \text{ devient } \mathcal{D}_m^n \dot{q}^m \frac{\partial}{\partial q^n}. \quad (1.2.44)$$

12. Nous rappelons les conventions d'écriture mathématique pour les ensembles de nombres

$$\mathbb{N} = \{0, 1, 2, \dots, \infty\}, \quad \mathbb{N}^* = \{1, 2, \dots, \infty\}, \quad \mathbb{N}_\lambda^* = \{1, 2, \dots, \lambda\} \quad (1.2.38)$$

et

$$\mathbb{Z} = \{-\infty, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, \infty\}, \quad \mathbb{Z}_\lambda = \{-\lambda, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, \lambda\}, \\ \mathbb{Z} \setminus \mathbb{Z}_\lambda = \{-\infty, \dots, -\lambda - 1, \lambda + 1, \dots, \infty\}. \quad (1.2.39)$$

LEMME 2 :

Lorsqu'il existe des liaisons indépendantes du temps entre certaines coordonnées, il est possible d'introduire des coefficients de dépendance \mathcal{D}_m^n et

$$\dot{q}^n \frac{\partial}{\partial q^n} = \mathcal{D}_m^n \dot{q}^m \frac{\partial}{\partial q^n}. \quad (1.2.45)$$

L'existence de liaisons entre les coordonnées modifie le système d'équations différentielles donnant l'évolution des coefficients C_k dans la combinaison linéaire constituant la fonction d'onde.

LEMME 3 :

Lorsqu'il existe des liaisons indépendantes du temps entre certaines coordonnées, le système d'équations différentielles qui régit l'évolution de la fonction d'onde est

$$\dot{C}_j(t) = -\mathcal{D}_m^n \dot{q}^m \sum_k^N \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_k(q) \rangle e^{i\varphi_{kj}(t)} C_k(t) \quad \text{avec } q = q(t). \quad (1.2.46)$$

La résolution de ce système d'équations différentielles se fait à q constant. La solution dépend ensuite de q dont nous ne feignons plus qu'il évolue aussi. Cependant en utilisant l'hypothèse du champ moyen, nous avons perdu l'équation qui gouverne l'évolution des variables collectives et nous ne disposons donc pas de la connaissance de $q(t)$. C'est l'équation de SCHRÖDINGER collective décrivant l'évolution des états collectifs $|\Upsilon(t)\rangle$ (notés avec la lettre grecque majuscule upsilon Υ pour ne pas utiliser Ψ ou Φ , qui le sont déjà par ailleurs)

$$\hat{\mathcal{H}} |\Upsilon(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Upsilon(t)\rangle \quad (1.2.47)$$

qui doit restituer cette information. Nous devons donc établir l'expression de son hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ suite à la résolution du système différentiel dans le cadre de l'approximation adiabatique. C'est pourquoi nous allons maintenant préciser ce cadre.

1.3 Description de l'évolution temporelle

Nous allons nous inspirer de la mécanique statistique et employer une procédure de moyenne temporelle [3] (bibliographie p. 43). Cette procédure fut surtout utilisée au commencement de la mécanique statistique et fut remplacée sous l'impulsion de Josiah GIBBS par l'utilisation des ensembles statistiques dans le cadre du principe ergodique. La mécanique statistique cherche à comprendre une évolution macroscopique d'un ensemble de particules par l'évolution microscopique de chacune des particules en mouvement incessant. Les grandeurs macroscopiques telles que la température ou la pression émergent d'une mesure nécessairement macroscopique et insensible aux mouvements trop rapides des trop nombreuses particules. S'il était possible de suivre avec une finesse microscopique l'évolution d'une grandeur, on verrait une évolution saccadée et discontinue constituée de fluctuations autour d'une évolution globale régulière et continue.

Dans le cas d'un système macroscopique à l'équilibre, l'agitation microscopique qui persiste est gommée parce que la mesure d'une grandeur F est insuffisamment fine temporellement. C'est pourquoi elle intègre toujours de nombreuses fluctuations de cette grandeur autour d'une valeur moyenne. Cette intégration des fluctuations microscopiques correspond mathématiquement à un calcul de moyenne temporelle pendant une durée τ suffisamment longue pour qu'il s'y produise de nombreuses fluctuations qui donnent une signification statistique à cette moyenne. Alors le passage du microscopique au macroscopique s'obtient en écrivant que, pendant la durée τ autour d'une date t , entre les instants t' et $t' + dt'$, la grandeur prend la valeur $F(t')$ qu'il faut affecter de la pondération $\frac{dt'}{\tau}$. La grandeur macroscopique mesurée \bar{F} est

$$\bar{F} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} dt' F(t'). \quad (1.3.1)$$

Puisque le système est à l'équilibre, la valeur moyenne ne dépend pas de l'instant t qui intervient dans les bornes de l'intégrale, ce qui est conforme à l'absence d'évolution. Cela se généralise à certaines situations d'évolution d'un système dans la mesure où il est possible de faire l'approximation de la limite de la durée τ infinie par une durée τ finie. En effet, l'utilisation d'une durée τ infinie condamnerait la perception d'une évolution ayant lieu sur une durée caractéristique finie τ_{col} . Il faut donc pouvoir garantir que :

$$\tau \ll \tau_{\text{col}}. \quad (1.3.2)$$

Cependant cette condition nécessaire n'est pas suffisante. Il faut également que la durée caractéristique des mouvements microscopiques τ_{ind} soit bien plus brève que la durée τ afin d'avoir une moyenne significative c'est-à-dire exempte de fluctuations rapides. C'est pourquoi il faut s'assurer que ces deux durées respectent la condition

$$\tau_{\text{ind}} \ll \tau \quad (1.3.3)$$

et dans ces conditions, les grandeurs macroscopiques ainsi définies

$$\bar{F}(t) = \frac{1}{\tau} \int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} dt' F(t') = \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} dt' F(t + t') \quad (1.3.4)$$

deviennent pertinentes, stables et dépendent de l'instant t comme l'exige leur évolution. En fait dans cette définition il ne faut pas oublier que la valeur de τ est déterminante¹³ ; ainsi \bar{F} dépend également de τ et nous devons écrire $\bar{F}(t, \tau)$.

13. Il est impossible de ne pas citer ici le philosophe Henri BERGSON, dont le travail à propos du temps fut si mal compris des physiciens :

« On chercherait vainement, en effet, à caractériser le souvenir d'un état passé si l'on ne commençait par définir la marque concrète, acceptée par la conscience, de la réalité présente. Qu'est-ce, pour moi, que le moment présent ? Le propre du temps est de s'écouler ; le temps déjà écoulé est le passé, et nous appelons présent l'instant où il s'écoule. Mais il ne peut être question ici d'un instant mathématique. Sans doute il y a un présent idéal, purement conçu, limite indivisible qui séparerait le passé de l'avenir. Mais le présent réel, concret, vécu, celui dont je parle quand je parle de ma perception présente, celui-là occupe nécessairement une durée. Où est donc située cette durée ?

« ../..

Nous appliquons un raisonnement de la même nature afin de déterminer l'équation d'évolution collective du noyau, situation où la constitution du noyau en nucléons est masquée au profit d'un quanton unique, le noyon. Cette équation d'évolution doit être une équation de SCHRÖDINGER, c'est-à-dire une équation de l'énergétique du noyau. C'est pourquoi nous devons nous intéresser à l'énergie de la collection des A nucléons et pour l'obtenir, nous utilisons l'information sur le noyau tout entier donnée par son état $|\Psi(t)\rangle$. Les coordonnées collectives q sont des paramètres de cet état, qui dépend aussi des conditions initiales collectives $q_0 = q(t_0)$. Nous suivons cet état $|\Psi(t)\rangle$ au cours du mouvement collectif avec $q = q(t)$, relation qui lie les différents q^i entre eux. En accord avec la terminologie en usage en hydrodynamique, nous disons qu'il s'agit, dans ce cas, d'une description lagrangienne du mouvement collectif du noyau.

Nous allons passer de la description lagrangienne du noyau à la description eulérienne. Cette description consiste à remplacer l'état $|\Psi(t)\rangle$ par un champ d'états $|\Psi(q, t)\rangle$ qui est défini sur l'espace sous-tendu par les coordonnées collectives q que nous nommons *l'espace collectif*. Ce champ inclut toutes les évolutions collectives selon toutes les conditions initiales. Le lien entre les deux descriptions est obtenu en disant que l'état $|\Psi(t)\rangle$ est la réalisation du champ d'états $|\Psi(q, t)\rangle$ le long de la ligne $q = q(t)$ dans l'espace collectif, ainsi

$$|\Psi(q(t), t)\rangle = |\Psi(t)\rangle = \sum_k^{\mathbb{N}} C_k(t) |\Psi_k(q(t))\rangle e^{i\varphi_k(t)}. \quad (1.3.5)$$

L'équation de SCHRÖDINGER

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{x}; q) |\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \quad \text{avec} \quad q = q(t) \quad (1.3.6)$$

devient

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{x}; q(t)) |\Psi(q(t), t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(q(t), t)\rangle \quad (1.3.7)$$

puis nous nous décrochons d'un mouvement collectif particulier en remplaçant cette équation de SCHRÖDINGER par une paire d'équations de SCHRÖDINGER. L'une porte sur le mouvement collectif $q(t)$, que nous verrons au chapitre 6, et l'autre où la mémoire de $q(t)$ a été effacée, libérant ainsi tous les q^i les uns par rapport aux autres, s'écrit

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{x}; q) |\Psi(q, t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(q, t)\rangle, \quad (1.3.8)$$

« Est-ce en deçà, est-ce au-delà du point mathématique que je détermine idéalement quand je pense à l'instant présent ? Il est trop évident qu'elle est en deçà et au-delà tout à la fois, et que ce que j'appelle *mon présent* empiète tout à la fois sur mon passé et sur mon avenir. Sur mon passé d'abord, car *le moment où je parle est déjà loin de moi* ; sur mon avenir ensuite, car c'est sur l'avenir que ce moment est penché, c'est à l'avenir que je tends, et si je pouvais fixer cet indivisible présent, cet élément infinitésimal de la courbe du temps, c'est la direction de l'avenir qu'il montrerait. Il faut donc que l'état psychologique que j'appelle *mon présent* soit tout à la fois une perception du passé immédiat et une détermination de l'avenir immédiat. Or, le passé immédiat, en tant que perçu, est, comme nous verrons, sensation, puisque toute sensation traduit une très longue succession d'ébranlements élémentaires ; et l'avenir immédiat, en tant que se déterminant, est action ou mouvement. Mon présent est donc à la fois sensation et mouvement ; et puisque mon présent forme un tout indivisé, ce mouvement doit tenir à cette sensation, la prolonger en action. D'où je conclus que mon présent consiste dans un système combiné de sensations et de mouvements. » [4] (bibliographie p. 43)

où

$$|\Psi(q, t)\rangle = \sum_k^{\text{N}} C_k(t) |\Psi_k(q)\rangle e^{i\varphi_k(t)} \quad (1.3.9)$$

et

$$\frac{d}{dt} |\Psi(q, t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(q, t)\rangle + \dot{q}^n \frac{\partial}{\partial q^n} |\Psi(q, t)\rangle. \quad (1.3.10)$$

L'énergie de la collection des A nucléons est donc un champ des variables collectives q et des vitesses collectives \dot{q} donnée par le produit scalaire de DIRAC de $\hat{\mathcal{H}}(\hat{x}; q) |\Psi(q, t)\rangle$ avec l'état $|\Psi(q, t)\rangle$

$$\langle \Psi(q, t) | \hat{\mathcal{H}}(\hat{x}; q) | \Psi(q, t) \rangle = \langle \Psi(q, t) | i\hbar \frac{d}{dt} | \Psi(q, t) \rangle \quad (1.3.11)$$

$$= \langle \Psi(q, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Psi(q, t) \rangle + \langle \Psi(q, t) | i\hbar \dot{q}^n \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi(q, t) \rangle, \quad (1.3.12)$$

et c'est pourquoi nous écrivons

$$E(q, \dot{q}, t) = \langle \Psi(q, t) | \hat{\mathcal{H}}(\hat{x}; q) | \Psi(q, t) \rangle \quad (1.3.13)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^{3A}} dx dy dz \Psi^*(\hat{x}, q, t) \hat{\mathcal{H}}(\hat{x}; q) \Psi(\hat{x}, q, t) \quad (1.3.14)$$

$$= \sum_{j,k}^{\text{N}} C_j^*(t) e^{-i\varphi_j(t)} C_k(t) e^{i\varphi_k(t)} \langle \Psi_j(q) | \hat{\mathcal{H}}(\hat{x}; q) | \Psi_k(q) \rangle \quad (1.3.15)$$

$$= \sum_{j,k}^{\text{N}} C_j^*(t) C_k(t) e^{i\varphi_{kj}(t)} \mathcal{E}_k(q) \langle \Psi_j(q) | \Psi_k(q) \rangle \quad (1.3.16)$$

$$= \sum_{j,k}^{\text{N}} C_j^*(t) C_k(t) e^{i\varphi_{kj}(t)} \mathcal{E}_k(q) \delta_{jk} \quad (1.3.17)$$

$$= \sum_j^{\text{N}} |C_j(t)|^2 \mathcal{E}_j(q). \quad (1.3.18)$$

Cette énergie E fluctue avec une durée caractéristique τ_{ind} puisqu'elle incorpore les mouvements individuels rapides. Or, nous voulons une équation qui décrive une évolution du noyau avec une durée caractéristique τ_{col} . Nous devons donc introduire un paramètre phénoménologique, la durée τ telle que

$$\tau_{\text{ind}} \ll \tau \ll \tau_{\text{col}}. \quad (1.3.19)$$

En effectuant une moyenne temporelle sur cette durée, nous allons faire émerger de l'équation de SCHRÖDINGER à A particules une énergie collective puis un hamiltonien collectif à l'aide des règles de quantification précisées ultérieurement.

DÉFINITION 1 : ÉNERGIE COLLECTIVE DU NOYAU

L'énergie collective du noyau en tant que quanton est

$$\bar{E}(q, \dot{q}; t, \tau) = \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} dt' E(q, \dot{q}, t + t'). \quad (1.3.20)$$

Le choix¹⁴ de la valeur de τ est crucial pour la théorie puisqu'il justifie la définition de nouvelles grandeurs collectives par une moyenne temporelle. Ce choix est guidé par la physique nucléaire. Nous devons maintenant indiquer le choix de la durée caractéristique τ qui semble adapté. Dans la première partie nous rappelions les ordres de grandeur des deux autres durées caractéristiques¹⁵

$$\tau_{\text{ind}} = 1 \times 10^{-22} \text{ s} \quad \text{et} \quad \tau_{\text{col}} = 5 \times 10^{-21} \text{ s}. \quad (1.3.21)$$

Pouvons-nous encore considérer que nous sommes dans un cadre similaire à celui de la mécanique statistique avec $\tau_{\text{ind}} \ll \tau \ll \tau_{\text{col}}$?

En mécanique statistique, dans le cas d'un gaz dans des conditions ordinaires, les ordres de grandeur sont bien différents. La durée individuelle τ_{ind} est la durée entre deux chocs moléculaires et la durée collective τ_{col} est la durée caractéristique d'une transformation thermodynamique d'un gaz

$$\tau_{\text{ind}} = 10^2 \text{ ps} \quad \text{et} \quad \tau_{\text{col}} = 10^2 \text{ } \mu\text{s} \quad (1.3.22)$$

conduisant assez naturellement à

$$\tau = 10^2 \text{ ns}. \quad (1.3.23)$$

Dans le cas de la physique nucléaire, nous ne sommes pas aussi chanceux et nous allons privilégier l'écart entre τ et τ_{col} afin de conserver la trace de l'évolution collective. La définition de la moyenne est toujours valide ; toutefois elle est dès lors touchée par des fluctuations qui sont néanmoins adoucies.

PROPOSITION 3 : VALEUR DE LA DURÉE INTERMÉDIAIRE

Nous proposons de choisir

$$\tau = 0,5 \text{ zs} \text{ à } 1 \text{ zs} = 5 \times 10^{-22} \text{ s} \text{ à } 1 \times 10^{-21} \text{ s}. \quad (1.3.24)$$

~~~~~

Nous savons désormais comment faire émerger les grandeurs collectives de la théorie microscopique. Nous pouvons avancer dans la construction de l'équation de SCHRÖDINGER collective sur la base des prescriptions précédentes.

## 1.4 Le tenseur de masse

LE PAS suivant à réaliser dès lors est le calcul de l'énergie collective et pour cela nous devons achever la résolution du système différentiel donnant l'évolution des coefficients  $C_k$ . Nous

---

14. Le mot *choix* employé ici l'est à dessein. Il s'agit bien d'une décision arbitraire mais l'assimilation de ce choix arbitraire à une subjectivité n'est pas justifiée. Il s'agit d'un arbitraire parfaitement objectif car il est décidé avec des arguments clairement exposés. D'autre part les choix arbitraires ne sont pas l'apanage des Hommes, la nature a aussi effectué des choix arbitraires, comme la sensibilité de nos organes sensoriels, qui ne nous permettent pas de sentir la structure atomique de la matière, mais nous donnent à voir une matière de structure moyenne continue.

15. Les durées intervenant ici sont très brèves à l'échelle humaine. Le SI contient heureusement des préfixes qui permettent de définir des sous-multiples de la seconde adaptés à la taille du noyau. Le préfixe atto, a, signifie  $10^{-18}$ , le préfixe zepto, z, signifie  $10^{-21}$  et le préfixe yocto, y, signifie  $10^{-24}$ . La zeptoseconde, zs, est donc adaptée à l'environnement nucléaire.



rappelons que le théorème adiabatique signifie que, lors d'une évolution adiabatique, si le système est dans un état propre, il évolue en persistant dans cet état propre, qui se modifie lui-même au cours de l'évolution. Aussi nous considérons qu'à la date  $t_0$  le noyau se trouve dans l'état propre numéro  $i$

$$|\Psi(t_0)\rangle = |\Psi_i(q)\rangle, \quad (1.4.1)$$

et par conséquent

$$C_i(t_0) = 1, \quad C_{j \neq i}(t_0) = 0, \quad (1.4.2)$$

et avec l'expression des phases donnée précédemment, nous avons

$$\varphi_i(t_0) = 0, \quad \varphi_{j \neq i}(t_0) = 0. \quad (1.4.3)$$

Nous considérons alors que pendant la durée  $\tau$  proposée ci-dessus

$$C_i(t) \approx 1, \quad |C_{j \neq i}(t)| \ll |C_i(t)|, \quad t \in [t_0 - \frac{\tau}{2}, t_0 + \frac{\tau}{2}]. \quad (1.4.4)$$

### SCOLIE 1 : SIGNIFICATION DE L'ÉVOLUTION ADIABATIQUE

Le noyau dans l'état  $|\Psi_i(q)\rangle$  à  $t_0$  y persiste pour  $t > t_0$  en coévolution avec  $q(t)$ . L'état

$$|\Psi(t_0)\rangle = |\Psi_i[q(t_0)]\rangle \quad (1.4.5)$$

devient

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi_i[q(t)]\rangle \neq |\Psi_i[q(t_0)]\rangle \quad (1.4.6)$$

mais  $|\Psi(t)\rangle$  est développé sur la base des  $|\Psi_j[q(t_0)]\rangle$  que nous notons  $|\Psi_j(q)\rangle$  du fait de l'évolution lente de  $q$ . C'est pourquoi les coefficients  $C_k$  évoluent même si l'état ne change pas de nombre quantique  $i$ . Nous voyons donc bien que le choix de  $t_0$  n'a aucune importance.

~~~~~  
Sous ces conditions, le système d'équations différentielles du lemme 3 p. 20

$$(1.2.46) \quad \dot{C}_j(t) = -\mathcal{D}_m^n \dot{q}^m \sum_k^{\text{N}} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_k(q) \rangle e^{i\varphi_{kj}(t)} C_k(t)$$

se simplifie considérablement en¹⁶

$$\dot{C}_{j \neq i}(t) \approx -\mathcal{D}_m^n \dot{q}^m \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i(q) \rangle e^{i\varphi_{ij}(t)} \quad (1.4.7)$$

puisque nous avons négligé tous les termes avec $C_{k \neq i}(t)$ et retenu l'unique terme avec $C_i(t) \approx 1$. Dans ce cadre la résolution ne consiste plus qu'en une simple intégration entre l'instant initial t_0 et un instant $t \in [t_0 - \frac{\tau}{2}, t_0 + \frac{\tau}{2}]$

$$C_{j \neq i}(t) \approx - \int_{t_0}^t dt' \mathcal{D}_m^n \dot{q}^m(t') \langle \Psi_j[q(t')] | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i[q(t')] \rangle e^{i\varphi_{ij}(t')} \quad \text{pour } t \in [t_0 - \frac{\tau}{2}, t_0 + \frac{\tau}{2}] \quad (1.4.8)$$

16. Dans certaines équations qui vont suivre, le membre de gauche semble dépendre seulement de l'indice j alors que le membre de droite dépend de l'indice j et aussi de l'indice i . Cela vient du choix des conditions initiales. Mais en réalité le membre de gauche dépend bien de l'indice i , certes subtilement puisque j doit être différent de i .

avec, p. 17,

$$(1.2.25) \quad \varphi_{ij}(t) \approx \Omega_{ij}[q(t_0)](t - t_0).$$

Par conséquent

$$C_{j \neq i}(t) \approx -\mathcal{D}_m^n \dot{q}^m(t_0) \langle \Psi_j[q(t_0)] | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i[q(t_0)] \rangle \int_{t_0}^t dt' e^{i\Omega_{ij}[q(t_0)](t'-t_0)} \quad (1.4.9)$$

et l'intégrale qui reste se calcule aisément ¹⁷.

LEMME 4 :

La loi d'évolution des coefficients est finalement

$$C_{j \neq i}(t) \approx \frac{i\hbar [e^{i\varphi_{ij}(t)} - 1]}{\mathcal{E}_j[q(t_0)] - \mathcal{E}_i[q(t_0)]} \mathcal{D}_m^n \dot{q}^m(t_0) \langle \Psi_j[q(t_0)] | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i[q(t_0)] \rangle. \quad (1.4.13)$$

Nous venons de résoudre le système pour chaque coefficient d'indice j différent de l'indice i mais il est aussi possible d'écrire l'équation différentielle du coefficient C_i qui est

$$\dot{C}_i(t) \approx -\mathcal{D}_m^n \dot{q}^m \langle \Psi_i(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i(q) \rangle C_i(t) \quad (1.4.14)$$

dont la solution est

$$C_i(t) = \exp \left[-\mathcal{D}_m^n \dot{q}^m \langle \Psi_i(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i(q) \rangle (t - t_0) \right] \quad (1.4.15)$$

or, les opérateurs $\frac{\partial}{\partial q^n}$ vus depuis l'espace usuel permettent les transformations suivantes

$$\langle \Psi_i(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i(q) \rangle = \int_{\mathbb{R}^{3A}} dx dy dz \Psi_i^*(\hat{x}; q) \frac{\partial \Psi_i}{\partial q^n}(\hat{x}; q) \quad (1.4.16)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^{3A}} dx dy dz \frac{\partial |\Psi_i|^2}{\partial q^n}(\hat{x}; q) - \int_{\mathbb{R}^{3A}} dx dy dz \Psi_i(\hat{x}; q) \frac{\partial \Psi_i^*}{\partial q^n}(\hat{x}; q) \quad (1.4.17)$$

$$= \frac{\partial}{\partial q^n} \langle \Psi_i(q) | \Psi_i(q) \rangle - \langle \Psi_i(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i(q) \rangle^* \quad (1.4.18)$$

$$= 0 - \langle \Psi_i(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i(q) \rangle^* \quad (1.4.19)$$

17.

$$\int_{t_0}^t dt' e^{i\Omega_{ij}[q(t_0)](t'-t_0)} = \frac{1}{i\Omega_{ij}[q(t_0)]} e^{i\Omega_{ij}[q(t_0)](t'-t_0)} \Big|_{t_0}^t \quad (1.4.10)$$

$$= \frac{-i\hbar}{\mathcal{E}_j[q(t_0)] - \mathcal{E}_i[q(t_0)]} \left[e^{i\Omega_{ij}[q(t_0)](t-t_0)} - 1 \right] \quad (1.4.11)$$

$$= \frac{-i\hbar}{\mathcal{E}_j[q(t_0)] - \mathcal{E}_i[q(t_0)]} \left[e^{i\varphi_{ij}(t)} - 1 \right] \quad (1.4.12)$$

donc $\langle \Psi_i(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i(q) \rangle \in i\mathbb{R}$. C'est pourquoi nous posons

$$\tau_i = \frac{2\pi i}{\mathcal{D}_m^n \dot{q}^m \langle \Psi_i(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i(q) \rangle} \in \mathbb{R} \quad (1.4.20)$$

qui correspond à la période d'évolution du coefficient C_i qui suit une évolution harmonique

$$C_i(t) = \exp \left[-i2\pi \frac{t - t_0}{\tau_i} \right]. \quad (1.4.21)$$

Nous nous donnons ainsi les moyens d'un rétrocontrôle de l'approximation adiabatique que nous avons exprimée en considérant que $C_i(t) \approx 1$ pour $t \in [t_0 - \frac{\tau}{2}, t_0 + \frac{\tau}{2}]$. Nous avons certes $|C_i(t)| = 1$ mais l'argument de $C_i(t)$ est de plus en plus différent de zéro. Par conséquent, pour que l'approximation reste valable, il faut s'assurer que

$$\tau \ll \tau_i \quad \text{pour tout } i. \quad (1.4.22)$$

La connaissance de l'évolution est donc achevée dès lors que l'évolution propre de q est connue. Nous sommes maintenant en mesure d'établir la forme de l'équation d'évolution de q en calculant l'énergie du noyau $E(q, \dot{q}, t)$. Cette énergie dépend évidemment de l'état propre intervenant dans les conditions initiales, c'est pourquoi nous modifions la notation E en E_i

$$E_i(q, \dot{q}, t) = \langle \Psi(q, t) | \hat{\mathcal{H}}(\hat{x}; q) | \Psi(q, t) \rangle = \sum_j^{\mathbb{N}} |C_j(t)|^2 \mathcal{E}_j(q) \quad (1.4.23)$$

$$= |C_i(t)|^2 \mathcal{E}_i(q) + \sum_{j \neq i}^{\mathbb{N}} |C_j(t)|^2 \mathcal{E}_j(q). \quad (1.4.24)$$

Nous avons mis en avant le coefficient C_i puisqu'il joue un rôle particulier d'après les conditions initiales. Nous faisons de même dans la condition de normalisation de l'état $|\Psi(t)\rangle$

$$\sum_j^{\mathbb{N}} |C_j(t)|^2 = 1, \quad (1.4.25)$$

ce qui nous donne

$$|C_i(t)|^2 = 1 - \sum_{j \neq i}^{\mathbb{N}} |C_j(t)|^2, \quad (1.4.26)$$

et nous permet d'écrire l'énergie précédente sous une forme plus suggestive :

$$E_i(q, \dot{q}, t) = \left(1 - \sum_{j \neq i}^{\mathbb{N}} |C_j(t)|^2 \right) \mathcal{E}_i(q) + \sum_{j \neq i}^{\mathbb{N}} |C_j(t)|^2 \mathcal{E}_j(q) \quad (1.4.27)$$

pour obtenir un nouveau lemme.

LEMME 5 :

L'énergie du noyau en évolution adiabatique dans l'état $|\Psi_i(q)\rangle$ est

$$E_i(q, \dot{q}, t) = \mathcal{E}_i(q) + \sum_{j \neq i}^{\text{N}} |C_j(t)|^2 [\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_i(q)]. \quad (1.4.28)$$

SCOLIE 2 : LE TEMPS COLLECTIF

Pour établir ce dernier résultat, nous avons eu recours à l'approximation adiabatique, car le théorème adiabatique nous a servi pour décomposer la fonction d'onde en coévolution sur une base stationnaire instantanée. Cette expression est valable à tout instant au cours de l'évolution adiabatique. Comme en outre nous avons donné une expression aux coefficients $C_j(t)$ pour $t \in [t_0 - \frac{\tau}{2}, t_0 + \frac{\tau}{2}]$, nous obtenons une expression valable sur des durées τ glissantes au cours de l'évolution et t_0 joue le rôle du temps collectif dont la granularité est définie à partir de la durée caractéristique τ .

Nous remarquons que les coefficients C_j ont une dépendance linéaire vis-à-vis de la vitesse collective \dot{q} et donc les $|C_j|^2$ présentent une dépendance quadratique en \dot{q} . Cela nous suggère donc d'interpréter le second terme de la dernière équation comme une énergie cinétique et le premier comme une énergie potentielle

$$E_i(q, \dot{q}, t) = V_i(q) + T_i(q, \dot{q}, t). \quad (1.4.29)$$

PROPOSITION 4 :

L'énergie potentielle du noyau est

$$V_i(q) = \mathcal{E}_i(q), \quad (1.4.30)$$

elle s'identifie à l'énergie du noyau dans l'état i .

Remarquons que cette énergie potentielle ne présente pas de dépendance explicite en temps ni en vitesse, par conséquent elle est purement locale. Nous savons dès lors que l'énergie cinétique s'identifie exactement à l'énergie cinétique effective de la définition 15 p. 193 car impulsion et quantité de mouvement se confondent en utilisant l'équation (5.4.23) à la même page.

PROPOSITION 5 :

L'énergie cinétique du noyau est

$$T_i(q, \dot{q}, t) = \sum_{j \neq i}^{\text{N}} |C_j(t)|^2 [\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_i(q)]. \quad (1.4.31)$$

Il ne nous reste plus qu'à injecter dans l'expression de l'énergie cinétique celle des coefficients C_j que nous venons d'établir au lemme 4 p. 26. Alors pour $t \in [t_0 - \frac{\tau}{2}, t_0 + \frac{\tau}{2}]$

$$(1.4.13) \quad C_{j \neq i}(t) \approx \frac{i\hbar [e^{i\varphi_{ij}(t)} - 1]}{\mathcal{E}_j[q(t_0)] - \mathcal{E}_i[q(t_0)]} \mathcal{D}_m^n \dot{q}^m(t_0) \langle \Psi_j[q(t_0)] | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i[q(t_0)] \rangle$$

donc

$$C_{j \neq i}^*(t) \approx \frac{-i\hbar [e^{-i\varphi_{ij}(t)} - 1]}{\mathcal{E}_j[q(t_0)] - \mathcal{E}_i[q(t_0)]} \mathcal{D}_\ell^{k*} \dot{q}^{\ell*}(t_0) \langle \Psi_j[q(t_0)] | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_i[q(t_0)] \rangle^*, \quad (1.4.32)$$

d'où

$$|C_{j \neq i}(t)|^2 \approx \frac{\hbar^2 |e^{i\varphi_{ij}(t)} - 1|^2}{(\mathcal{E}_j[q(t_0)] - \mathcal{E}_i[q(t_0)])^2} \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \dot{q}^m(t_0) \dot{q}^{\ell*}(t_0) \times \langle \Psi_j[q(t_0)] | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i[q(t_0)] \rangle \langle \Psi_j[q(t_0)] | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_i[q(t_0)] \rangle^*. \quad (1.4.33)$$

Puis nous calculons l'énergie cinétique pour $t \in [t_0 - \frac{\tau}{2}, t_0 + \frac{\tau}{2}]$

$$T_i[q(t_0), \dot{q}(t_0), t] \approx \hbar^2 \dot{q}^m(t_0) \dot{q}^{\ell*}(t_0) \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \times \sum_{j \neq i}^N \frac{|e^{i\varphi_{ij}(t)} - 1|^2}{(\mathcal{E}_j[q(t_0)] - \mathcal{E}_i[q(t_0)])^2} (\mathcal{E}_j[q(t)] - \mathcal{E}_i[q(t)]) \times \langle \Psi_j[q(t_0)] | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i[q(t_0)] \rangle \langle \Psi_j[q(t_0)] | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_i[q(t_0)] \rangle^*. \quad (1.4.34)$$

Or, avec l'évolution lente des grandeurs collectives, nous pouvons écrire

$$\mathcal{E}_j[q(t)] - \mathcal{E}_i[q(t)] \approx \mathcal{E}_j[q(t_0)] - \mathcal{E}_i[q(t_0)], \quad (1.4.35)$$

ce qui simplifie l'expression de l'énergie cinétique

$$T_i[q(t_0), \dot{q}(t_0), t] \approx \hbar^2 \dot{q}^m(t_0) \dot{q}^{\ell*}(t_0) \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{j \neq i}^N \frac{|e^{i\varphi_{ij}(t)} - 1|^2}{\mathcal{E}_j[q(t_0)] - \mathcal{E}_i[q(t_0)]} \times \langle \Psi_j[q(t_0)] | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i[q(t_0)] \rangle \langle \Psi_j[q(t_0)] | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_i[q(t_0)] \rangle^*, \quad (1.4.36)$$

sans oublier que, p. 17,

$$(1.2.25) \quad \varphi_{ij}(t) \approx \Omega_{ij}[q(t_0)](t - t_0).$$

Comme les grandeurs collectives sont toutes prises à la date t_0 , nous simplifions encore

$$T_i(q, \dot{q}, t) \approx \hbar^2 \dot{q}^m \dot{q}^{\ell*} \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{j \neq i}^N \frac{|e^{i(t-t_0)\Omega_{ij}(q)} - 1|^2}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_i(q)} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i(q) \rangle \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_i(q) \rangle^*, \quad (1.4.37)$$

ou encore pour rappeler que ces expressions sont valables pour $t \in [t_0 - \frac{\tau}{2}, t_0 + \frac{\tau}{2}]$, nous posons $t = t_0 + t'$ et $t' \in [-\frac{\tau}{2}, \frac{\tau}{2}]$

$$T_i(q, \dot{q}, t_0 + t') \approx \hbar^2 \dot{q}^m \dot{q}^{\ell*} \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{j \neq i}^N \frac{|e^{it'\Omega_{ij}(q)} - 1|^2}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_i(q)} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i(q) \rangle \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_i(q) \rangle^*. \quad (1.4.38)$$

Nous appliquons maintenant la procédure consistant à « gommer » les fluctuations par une moyenne temporelle sur la durée τ

$$\bar{E}_i(q, \dot{q}; t_0, \tau) = \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} dt' E_i(q, \dot{q}, t_0 + t') \quad (1.4.39)$$

avec une expression de $E_i(q, \dot{q}, t_0 + t')$ valide pour $t' \in [-\frac{\tau}{2}, \frac{\tau}{2}]$. La variable t_0 jouant le rôle de temps collectif, et puisque toute la dépendance temporelle a été rendue implicite à travers $q(t)$, il devient superflu de maintenir la variable t_0 comme argument de $\bar{E}_i(q, \dot{q}; t_0, \tau)$; c'est pourquoi dans la suite

$$\bar{E}_i(q, \dot{q}; t_0, \tau) \text{ devient } \bar{E}_i(q, \dot{q}; \tau).$$

Nous calculons la moyenne temporelle séparément pour l'énergie cinétique et l'énergie potentielle. La situation la plus simple est celle de l'énergie potentielle puisqu'elle ne dépend pas explicitement du temps.

THÉORÈME 2 : ÉNERGIE POTENTIELLE COLLECTIVE

L'énergie potentielle collective du noyau en tant que quanton est

$$\bar{V}_i(q; \tau) = \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} dt' \mathcal{E}_i(q) \quad \text{avec } q = q(t') \quad (1.4.40)$$

$$\approx \mathcal{E}_i(q), \quad (1.4.41)$$

elle s'identifie à l'énergie du noyau dans l'état i . ~~~~~

Dans le cas de l'énergie cinétique

$$\bar{T}_i(q, \dot{q}; \tau) = \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} dt' T_i(q, \dot{q}, t_0 + t'), \quad (1.4.42)$$

il n'y a qu'un seul facteur, $|e^{it'\Omega_{ij}(q)} - 1|^2$, qui dépend explicitement du temps et que nous isolons en utilisant la lettre aleph, \aleph , de l'alphabet hébreu. Nous posons donc

$$\aleph_{ij}(q; \tau) = \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} dt' |e^{it'\Omega_{ij}(q)} - 1|^2, \quad (1.4.43)$$

dont l'expression analytique s'obtient très facilement. Nous écrivons

$$\aleph_{ij}(q; \tau) = \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} dt' |e^{it'\Omega_{ij}(q)} - 1|^2 = \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} dt' (e^{it'\Omega_{ij}(q)} - 1) (e^{-it'\Omega_{ij}(q)} - 1) \quad (1.4.44)$$

$$= \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} dt' (1 - e^{it'\Omega_{ij}(q)} - e^{-it'\Omega_{ij}(q)} + 1) = \frac{2}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} dt' (1 - \cos[t'\Omega_{ij}(q)]) \quad (1.4.45)$$

$$= \frac{2}{\tau} \left(t' - \frac{1}{\Omega_{ij}(q)} \sin[t'\Omega_{ij}(q)] \right) \Big|_{-\frac{\tau}{2}}^{+\frac{\tau}{2}} = \frac{2}{\tau} \left(\tau - \frac{2}{\Omega_{ij}(q)} \sin \left(\frac{\Omega_{ij}(q)\tau}{2} \right) \right) \quad (1.4.46)$$

$$= 2 - 2 \frac{2}{\Omega_{ij}(q)\tau} \sin \left(\frac{\Omega_{ij}(q)\tau}{2} \right) \quad (1.4.47)$$

$$= 2 - \frac{2}{\frac{\Omega_{ij}(q)\tau}{2}} \sin\left(\frac{\Omega_{ij}(q)\tau}{2}\right), \quad (1.4.48)$$

et nous utilisons la fonction sinus cardinal, bien connue en théorie de la diffraction

$$\text{sinc } x = \frac{\sin x}{x}. \quad (1.4.49)$$

THÉORÈME 3 : LA TEMPORISATRICE \aleph

Dans l'expression de l'énergie cinétique collective, il faut incorporer une fonction, la temporisatrice, liée à la durée caractéristique servant à définir les grandeurs collectives

$$\aleph_{ij}(q; \tau) = 2 - 2 \text{sinc}\left(\frac{\Omega_{ij}(q)\tau}{2}\right). \quad (1.4.50)$$

Nous avons alors

$$\bar{T}_i(q, \dot{q}; \tau) \approx \hbar^2 \dot{q}^m \dot{q}^{\ell*} \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{j \neq i}^{\text{N}} \frac{\aleph_{ij}(q; \tau)}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_i(q)} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i(q) \rangle \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_i(q) \rangle^*. \quad (1.4.51)$$

DÉFINITION 2 : TENSEUR DE MASSE

Nous appelons tenseur de masse

$$B_{i,m\ell}(q; \tau) = 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{j \neq i}^{\text{N}} \frac{\aleph_{ij}(q; \tau)}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_i(q)} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_i(q) \rangle \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_i(q) \rangle^*. \quad (1.4.52)$$

THÉORÈME 4 : ÉNERGIE CINÉTIQUE COLLECTIVE

L'énergie cinétique collective du noyau en tant que quanton est

$$\bar{T}_i(q, \dot{q}; \tau) \approx \frac{1}{2} B_{i,m\ell}(q; \tau) \dot{q}^m \dot{q}^{\ell*}, \quad (1.4.53)$$

c'est une forme quadratique de la vitesse collective.

À partir d'ici, nous restreignons les équations au cas des vibrations de l'état fondamental du noyau qui sont les plus accessibles expérimentalement. Cette restriction n'affaiblit nullement la généralité des propos mais nous permet de simplifier un peu la notation puisqu'il s'agit de poser

$$i = 0, \quad (1.4.54)$$

et c'est pourquoi nous omettons l'indice i à plusieurs endroits dans ce qui suit. En particulier le tenseur de masse est écrit

$$B_{m\ell}(q; \tau) = 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_j^{\text{N}^*} \frac{\aleph_{0j}(q; \tau)}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_0(q)} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0(q) \rangle \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0(q) \rangle^*. \quad (1.4.55)$$

Les théorèmes 2 p. 30 et 4 montrent que l'énergie collective du noyau est fonction des grandeurs collectives q qui évoluent adiabatiquement. Par conséquent le noyau en tant que quanton, le noyau, se meut dans l'espace sous-tendu par les coordonnées collectives, l'espace collectif. Le théorème 4, la définition 2 et le cadre de la mécanique analytique développé dans les chapitres 5 et 6 suggèrent que l'espace collectif est un espace métrique de RIEMANN, dont la métrique est donnée par le tenseur de masse $B_{m\ell}(q; \tau)$.

1.5 Discussion des nouveaux aspects concernant le tenseur de masse

NOUS AVONS maintenant retrouvé les résultats bien connus de la théorie du tenseur d'inertie nucléaire (voir [7] et [8] bibliographie p. 43) mais en y apportant quelques amendements. Nous avons introduit un paramètre phénoménologique τ traduisant le passage de l'étude d'une collection de nucléons à une collectivité acquérant le statut d'objet quantique sans sous-structure. Nous avons ainsi doté la théorie d'un paramètre de contrôle de l'approximation effectuée, ce qui est la moindre des choses pour une théorie.

$$B_{m\ell}(q) = 2\hbar^2 \sum_j^{\mathbb{N}^*} \frac{1}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_0(q)} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^m} | \Psi_0(q) \rangle \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^\ell} | \Psi_0(q) \rangle^* \quad (1.5.1)$$

↓

$$(1.4.55) \quad B_{m\ell}(q; \tau) = 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_j^{\mathbb{N}^*} \frac{\aleph_{0j}(q; \tau)}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_0(q)} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0(q) \rangle \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0(q) \rangle^*$$

avec, p. 31,

$$(1.4.50) \quad \aleph_{0j}(q; \tau) = 2 - 2 \operatorname{sinc} \left(\frac{\Omega_{0j}(q)\tau}{2} \right) \quad \text{et} \quad \Omega_{0j}(q) = \frac{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_0(q)}{\hbar}.$$

Nous avons aussi montré que l'expression usuelle du tenseur d'inertie nucléaire correspond à une bonne intuition de la forme correcte dans le cadre de la théorie, mais que la forme correcte contient en plus un facteur que nous avons appelé la temporisatrice, \aleph_{0j} , qui dépend des variables collectives et de la durée caractéristique τ .

Donnons sur le champ une évaluation de la pulsation Ω_{0j} qui dépend de la différence de niveaux d'énergie

$$\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_0(q) = 10^{-1} \text{ MeV à } 10^2 \text{ MeV} \quad (1.5.2)$$

avec

$$\hbar \approx 6,582 \times 10^{-22} \text{ MeV} \cdot \text{s}, \quad (1.5.3)$$

nous obtenons

$$\Omega_{0j} \approx 1,5 \times 10^{20} \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1} \text{ à } 1,5 \times 10^{23} \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1}. \quad (1.5.4)$$

Or, avec la proposition 3 p. 24, nous avons donné un encadrement de τ

$$\tau \approx 0,5 \times 10^{-21} \text{ s à } 1 \times 10^{-21} \text{ s} \quad (1.5.5)$$

ainsi

$$x = \frac{\Omega_{0j}(q)\tau}{2} \approx 4 \times 10^{-2} \text{ à } 8 \times 10^1. \quad (1.5.6)$$

Nous donnons à la figure 1.1 p. 33 la représentation graphique de la temporisatrice $\aleph_{0j}(q; \tau)$ dans le domaine que nous venons d'établir. Il s'agit d'une fonction variant entre 0 et 2,4, qui, partant

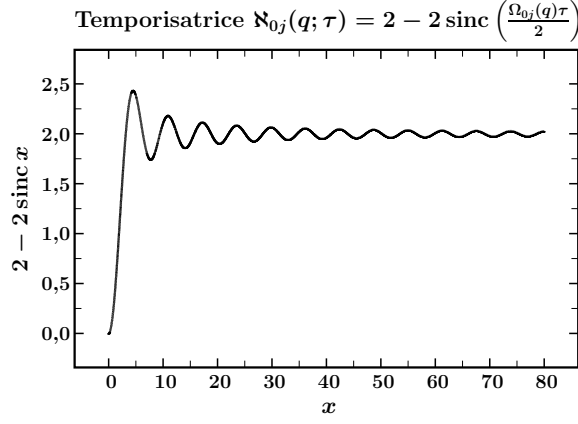


Figure 1.1 – Allure de la temporisatrice \aleph

de 0, tend de manière oscillante vers une asymptote horizontale correspondant à la valeur limite 2.

Avant d'en venir au scolie concernant ce résultat, nous voulons encore écrire l'expression du tenseur de masse dans le cas particulier et important des coordonnées de forme

$$q^n \rightarrow \alpha_{\lambda'}^{\mu'}, \quad q^k \rightarrow \alpha_{\rho'}^{\sigma'}, \quad \mathcal{D}_m^n \rightarrow \mathcal{D}_{\lambda'\mu'}^{\lambda\mu'}, \quad \mathcal{D}_\ell^k \rightarrow \mathcal{D}_{\rho'\sigma'}^{\rho\sigma'}, \quad B_{m\ell}(q; \tau) \rightarrow B_{(\lambda\mu)(\rho\sigma)}(\alpha; \tau) \quad (1.5.7)$$

et alors

$$B_{(\lambda\mu)(\rho\sigma)}(\alpha; \tau) = 2\hbar^2 \mathcal{D}_{\lambda'\mu'}^{\lambda\mu'} \mathcal{D}_{\rho'\sigma'}^{\rho\sigma'} \sum_j^{\mathbb{N}^*} \frac{\aleph_{0j}(\alpha; \tau)}{\mathcal{E}_j(\alpha) - \mathcal{E}_0(\alpha)} \langle \Psi_j(\alpha) | \frac{\partial}{\partial \alpha_{\lambda'\mu'}} | \Psi_0(\alpha) \rangle \langle \Psi_j(\alpha) | \frac{\partial}{\partial \alpha_{\rho'\sigma'}} | \Psi_0(\alpha) \rangle^*. \quad (1.5.8)$$

SCOLIE 3 : APPORT DE LA TEMPORISATRICE \aleph

Dans le cas où $x = \frac{\Omega_{0j}(\alpha)\tau}{2}$ prend une faible valeur pour τ fixé, cela signifie que $\mathcal{E}_j(\alpha) - \mathcal{E}_0(\alpha)$ est proche d'une valeur nulle. Or, cette différence intervient au dénominateur dans l'expression du tenseur de masse. Dans l'expression antérieure à nos travaux, cette situation était embarrassante, produisant un tenseur de masse divergent

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{\mathcal{E}_j(\alpha) - \mathcal{E}_0(\alpha)} = \pm\infty, \quad (1.5.9)$$

et c'était une critique forte du modèle. Dans l'expression corrigée par le facteur $\aleph_{0j}(\alpha; \tau)$ que nous proposons, cette divergence est évitée puisque¹⁸

$$\frac{\aleph_{0j}(\alpha; \tau)}{\mathcal{E}_j(\alpha) - \mathcal{E}_0(\alpha)} \underset{x \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{3} \frac{\Omega_{0j}(\alpha)\tau}{2} \frac{\tau}{2\hbar} = \frac{x}{3} \frac{\tau}{2\hbar} \quad (1.5.16)$$

18. À partir de l'expression

$$\frac{\aleph_{0j}(\alpha; \tau)}{\mathcal{E}_j(\alpha) - \mathcal{E}_0(\alpha)} = \frac{\tau}{2\hbar} \frac{2 - 2 \operatorname{sinc} x}{x} \quad (1.5.10)$$

../..

et donc

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\aleph_{0j}(\alpha; \tau)}{\mathcal{E}_j(\alpha) - \mathcal{E}_0(\alpha)} = 0. \quad (1.5.17)$$

Dans le cas où x prend les valeurs supérieures du domaine, disons entre 2,7 et 4, $\aleph_{0j}(\alpha; \tau)$ prend des valeurs entre 1,7 et 2,4. Ceci est un résultat intéressant car il signifie que la théorie antérieure sous-estimait la valeur du tenseur de masse avec un facteur de l'ordre de 2. Or, une publication [9] (bibliographie p. 43) de J. DUDEK, W. DUDEK, E. RUCHOWSKA & J. SKALSKI montra en 1979 que les valeurs du tenseur de masse prévues par la théorie étaient systématiquement trop faibles par rapport aux résultats expérimentaux avec un facteur de l'ordre de 2 (voir le tableau 1.1 p. 35). Nous allons résumer les constatations de cette publication et apporter notre commentaire en prenant en compte les modifications que nous avons apportées à la théorie microscopique du mouvement nucléaire collectif.

La publication rappelle le cadre théorique du tenseur de masse à l'époque, et l'utilise dans le cas des déformations quadrupolaires $\alpha_2^0 \equiv \beta_2$ et hexadécapolaires axiales $\alpha_4^0 \equiv \beta_4$. On explique ensuite la méthode employée pour relier le résultat théorique du tenseur de masse au résultat expérimental sur la transition électromagnétique d'énergie $E(0_2^+)$ entre l'état fondamental et l'état excité à un seul phonon. Pour déterminer l'énergie théorique de cette transition électromagnétique, on établit une équation de SCHRÖDINGER collective approchée du type de celle d'un oscillateur harmonique. L'énergie potentielle collective obtenue par la méthode de Vilen STRUTINSKY présente un minimum en β_2^{eq} . La position de ce minimum nous permet de définir un espace euclidien tangent à l'espace de RIEMANN¹⁹. On résout l'équation dans cet espace tangent ; l'énergie potentielle est approchée par

$$\frac{1}{2}C (\beta_2 - \beta_2^{\text{eq}})^2 \quad (1.5.18)$$

et l'énergie cinétique est donnée par l'opérateur

$$-\frac{\hbar^2}{B_{22}(\beta_2^{\text{eq}})} \frac{d^2}{d\beta_2^2}, \quad (1.5.19)$$

nous faisons un développement limité au voisinage de 0

$$\sin x = x - \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} + o(x^5) \quad (1.5.11)$$

$$\text{sinc } x = 1 - \frac{x^2}{6} + \frac{x^4}{120} + o(x^4) \quad (1.5.12)$$

$$2 - 2 \text{sinc } x = \frac{x^2}{3} - \frac{x^4}{60} + o(x^4) \quad (1.5.13)$$

$$\frac{2 - 2 \text{sinc } x}{x} = \frac{x}{3} - \frac{x^3}{60} + o(x^3) \quad (1.5.14)$$

donc

$$\frac{2 - 2 \text{sinc } x}{x} \underset{x \rightarrow 0}{\sim} \frac{x}{3}. \quad (1.5.15)$$

19. Nous rappelons que dans la théorie de Bernhard RIEMANN un espace est doté d'une métrique qui varie dans l'espace mais que localement nous pouvons ramener un tel espace à un espace euclidien dont la métrique est uniforme, c'est l'espace euclidien tangent, de même qu'une courbe peut être localement approximée par sa tangente.

où

$$B_{22} \equiv B_{(20)(20)}. \quad (1.5.20)$$

Alors la valeur théoriquement attribuée à l'énergie d'un phonon est

$$E(0_2^+)_{\text{th}} = \hbar \sqrt{\frac{C}{B_{22}(\beta_2^{\text{eq}})}}. \quad (1.5.21)$$

On réalise donc la compilation des résultats théoriques fournis par deux théories microscopiques et des résultats expérimentaux pour quelques noyaux de lanthanides et d'actinides. On définit le rapport

$$R = \frac{E(0_2^+)_{\text{th}}}{E(0_2^+)_{\text{exp}}} \quad (1.5.22)$$

afin de faciliter la comparaison. Nous en déduisons que si $R < 1$ alors le tenseur de masse est probablement surestimé et si $R > 1$ alors le tenseur de masse est probablement sous-estimé. Au vu des résultats rassemblés dans le tableau 1.1, on constate très clairement et systématiquement

Noyaux	$E(0_2^+)_{\text{exp}}/\text{keV}$	$E(0_2^+)_{\text{th1}}/\text{keV}$	R_1	$E(0_2^+)_{\text{th2}}/\text{keV}$	R_2
^{148}Nd	911,0	1285,0	1,41	1231,0	1,35
^{150}Nd	677,0	1900,0	2,81	1708,0	2,52
^{152}Nd	1139,0	2060,0	1,81	2208,0	1,94
^{150}Sm	740,0	1310,0	1,77	1293,0	1,75
^{152}Sm	685,0	1584,0	2,31	1668,0	2,43
^{154}Sm	1099,8	1970,0	1,79	1902,0	1,73
^{156}Sm	1068,0	2140,0	2,00	2160,0	2,02
^{152}Gd	615,0	1243,0	2,02	1272,0	2,07
^{154}Gd	680,0	1524,0	2,24	1622,0	2,38
^{156}Gd	1049,0	-	-	1888,0	1,80
^{158}Gd	1196,0	2152,0	1,80	2180,0	1,82
^{156}Dy	675,0	1394,0	2,06	1506,0	2,23
^{158}Dy	991,0	1663,0	1,68	1787,0	1,80
^{160}Dy	1275,0	2048,0	1,61	2098,0	1,62
^{172}Hf	871,0	1590,0	1,82	1700,0	1,95
^{174}Hf	827,0	1490,0	1,80	1691,0	2,04

Tableau 1.1 – Comparaison des énergies de transition $E(0_2^+)$ prévues théoriquement avec les valeurs expérimentales.

que $R > 1$ et même que $R \approx 2$. Le tenseur de masse est donc sous-estimé. Les modifications théoriques que nous avons apportées affirment que les valeurs du tenseur de masse doivent être à peu près doublées. C'est de prime abord insuffisant pour corriger la sous-estimation d'un facteur

2 pour les énergies $E(0_2^+)$ puisque le tenseur de masse intervient par sa racine carrée dans l'expression de ces énergies. Cependant c'est déjà une amélioration et par ailleurs les réalisations numériques antérieures sont restées assez sommaires en égard aux moyens de calcul de l'époque. Nous sommes aujourd'hui en mesure de prendre en compte bien plus de dimensions collectives et de résoudre numériquement avec le programme SE_COL, écrit par nos soins, l'équation de SCHRÖDINGER collective au lieu d'en prendre une approximation harmonique unidimensionnelle qui résulte d'autres approximations telles que l'approximation WKB (WENTZEL, KRAMERS, BRILLOUIN).



Nous disposons désormais d'un cadre physique fermement établi pour pouvoir étudier les phénomènes collectifs du noyau. Or, les symétries géométriques du noyau et les transitions de forme font partie des phénomènes collectifs. C'est pourquoi nous allons maintenant voir comment il est possible d'attribuer une forme au noyau et comment introduire des symétries géométriques dans la théorie nucléaire.

Annexes du chapitre 1

Annexe A₁

Résolution alternative du système différentiel des coefficients C_k

Nous voulons indiquer une autre manière d'établir et de résoudre le système d'équations différentielles donné au lemme 1 p. 18. Pour cela nous reprenons la définition de l'état $|\Psi(t)\rangle$ p. 16

$$(1.2.13) \quad |\Psi(t)\rangle = \sum_k^{\mathbb{N}} C_k(t) |\Psi_k(q)\rangle e^{i\varphi_k(t)} \quad \text{avec} \quad q = q(t),$$

où les coefficients $C_k(t)$ que l'on cherche à connaître sont des nombres complexes. Mais ici nous allons incorporer la phase en définissant de nouveaux coefficients

$$\underline{C}_k(t) = C_k(t) e^{i\varphi_k(t)}, \quad (\text{A}_1.1)$$

d'où

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k^{\mathbb{N}} \underline{C}_k(t) |\Psi_k(q)\rangle. \quad (\text{A}_1.2)$$

En remplaçant cet état dans l'équation de SCHRÖDINGER à A particules et dépendante du temps, nous aboutissons rapidement à

$$\dot{\underline{C}}_j(t) = \sum_k^{\mathbb{N}} \underline{C}_k(t) \langle \Psi_j(q) | \delta_{jk} \frac{\mathcal{E}_k(q)}{i\hbar} - \dot{q}^n \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_k(q) \rangle, \quad (\text{A}_1.3)$$

qui n'est autre qu'un système d'équations différentielles du premier ordre à coefficients « quasi-statiques ». En effet, nous rappelons que certes q évolue mais cette évolution est bien plus lente que celle des coefficients \underline{C}_k . La solution d'un tel système est bien connue. Il suffit d'introduire le vecteur colonne $\underline{C}(t)$ des coefficients $\underline{C}_k(t)$ et une matrice $A(q)$ telle que

$$A_{jk}(q) = \langle \Psi_j(q) | \delta_{jk} \frac{\mathcal{E}_k(q)}{i\hbar} - \dot{q}^n \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_k(q) \rangle. \quad (\text{A}_1.4)$$

Alors le système différentiel s'écrit simplement

$$\dot{\underline{C}}(t) = A(q) \underline{C}(t). \quad (\text{A}_1.5)$$

Pour résoudre ce système, il suffit de diagonaliser la matrice $A(q)$. Notons les couples de valeurs et vecteurs propres $\{\lambda_0(q), V_0(q)\}, \{\lambda_1(q), V_1(q)\}, \dots$; alors la solution est

$$\underline{C}(t) = \alpha_0 e^{\lambda_0(q)(t-t_0)} V_0(q) + \alpha_1 e^{\lambda_1(q)(t-t_0)} V_1(q) + \dots \quad \text{et} \quad q = q(t), \quad (\text{A}_1.6)$$

et les coefficients $\alpha_0, \alpha_1, \dots$ sont déterminés à l'aide des conditions initiales. Nous voyons que la solution est *a priori* totalement connue; cependant les coefficients de la matrice $A(q)$ sont eux difficilement connaissables de manière analytique, ce qui réduit notablement la portée de cette méthode. Aussi nous allons revenir au premier système différentiel et le résoudre dans le cadre de l'approximation adiabatique à la section 1.4 p. 24.

Annexe B₁

Des coordonnées de forme complexes

Si les coordonnées de forme ne sont plus réelles, il faut reprendre les calculs effectués pour écarter les coordonnées redondantes dues à la relation, p. 18,

$$(1.2.28) \quad \alpha_\lambda^{-\mu} = (-1)^\mu (\alpha_\lambda^\mu)^*.$$

Posons

$$\beta_\lambda^\mu = \operatorname{Re} \alpha_\lambda^\mu \quad \gamma_\lambda^\mu = \operatorname{Im} \alpha_\lambda^\mu \quad (\text{B}_1.1)$$

alors

$$\beta_\lambda^{-\mu} = (-1)^\mu \beta_\lambda^\mu \quad \gamma_\lambda^{-\mu} = -(-1)^\mu \gamma_\lambda^\mu. \quad (\text{B}_1.2)$$

Mais l'écriture

$$\dot{\alpha}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu}$$

n'a plus de sens dans la mesure où la dérivation par rapport à une variable complexe n'est définie que pour une fonction holomorphe¹ et doit être remplacée par

$$\dot{\beta}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \beta_\lambda^\mu} + \dot{\gamma}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \gamma_\lambda^\mu}.$$

Il faut alors reprendre la séparation des coordonnées redondantes

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \dot{\alpha}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu} \rightarrow \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \left[\dot{\beta}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \beta_\lambda^\mu} + \dot{\gamma}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \gamma_\lambda^\mu} \right]$$

1. Une fonction holomorphe est une fonction f d'une variable complexe z qui respecte les conditions de CAUCHY-RIEMANN, à savoir

$$\frac{\partial f}{\partial z}(z_0) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial \operatorname{Re} z}(\operatorname{Re} z_0, \operatorname{Im} z_0) - i \frac{\partial f}{\partial \operatorname{Im} z}(\operatorname{Re} z_0, \operatorname{Im} z_0) \right) = f'(z_0) \quad (\text{B}_1.3)$$

et

$$\frac{\partial f}{\partial z^*}(z_0) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial \operatorname{Re} z}(\operatorname{Re} z_0, \operatorname{Im} z_0) + i \frac{\partial f}{\partial \operatorname{Im} z}(\operatorname{Re} z_0, \operatorname{Im} z_0) \right) = 0. \quad (\text{B}_1.4)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left[\sum_{\mu=1}^{\lambda} \dot{\beta}_{\lambda}^{-\mu} \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^{-\mu}} + \dot{\beta}_{\lambda}^0 \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^0} + \sum_{\mu=1}^{\lambda} \dot{\beta}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^{\mu}} \right] \\
&\quad + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left[\sum_{\mu=1}^{\lambda} \dot{\gamma}_{\lambda}^{-\mu} \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^{-\mu}} + \dot{\gamma}_{\lambda}^0 \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^0} + \sum_{\mu=1}^{\lambda} \dot{\gamma}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^{\mu}} \right], \tag{B1.5}
\end{aligned}$$

puis nous utilisons les mêmes astuces pour éliminer les coordonnées redondantes, avec d'une part

$$\frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^{-\mu}} = \frac{\partial \beta_{\lambda}^{\nu}}{\partial \beta_{\lambda}^{-\mu}} \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^{\nu}} = (-1)^{\mu} \delta_{\mu}^{\nu} \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^{\nu}} = (-1)^{\mu} \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^{\mu}} \quad \text{et} \quad \dot{\beta}_{\lambda}^{-\mu} = (-1)^{\mu} \dot{\beta}_{\lambda}^{\mu} \tag{B1.6}$$

et d'autre part

$$\frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^{-\mu}} = \frac{\partial \gamma_{\lambda}^{\nu}}{\partial \gamma_{\lambda}^{-\mu}} \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^{\nu}} = -(-1)^{\mu} \delta_{\mu}^{\nu} \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^{\nu}} = -(-1)^{\mu} \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^{\mu}} \quad \text{et} \quad \dot{\gamma}_{\lambda}^{-\mu} = -(-1)^{\mu} \dot{\gamma}_{\lambda}^{\mu}. \tag{B1.7}$$

Subséquentement

$$\begin{aligned}
\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \dot{\alpha}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \alpha_{\lambda}^{\mu}} &\rightarrow \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left[\sum_{\mu=1}^{\lambda} (-1)^{\mu} \dot{\beta}_{\lambda}^{\mu} (-1)^{\mu} \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^{\mu}} + \dot{\beta}_{\lambda}^0 \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^0} + \sum_{\mu=1}^{\lambda} \dot{\beta}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^{\mu}} \right] \\
&\quad + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left[\sum_{\mu=1}^{\lambda} (-(-1)^{\mu}) \dot{\gamma}_{\lambda}^{\mu} (-(-1)^{\mu}) \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^{\mu}} + \dot{\gamma}_{\lambda}^0 \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^0} + \sum_{\mu=1}^{\lambda} \dot{\gamma}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^{\mu}} \right] \tag{B1.8}
\end{aligned}$$

$$= \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left[\dot{\beta}_{\lambda}^0 \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^0} + \dot{\gamma}_{\lambda}^0 \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^0} + 2 \sum_{\mu=1}^{\lambda} \left(\dot{\beta}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^{\mu}} + \dot{\gamma}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^{\mu}} \right) \right] \tag{B1.9}$$

$$= \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{\lambda} (2 - \delta_{\mu 0}) \left(\dot{\beta}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^{\mu}} + \dot{\gamma}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^{\mu}} \right) \tag{B1.10}$$

$$= \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\lambda'=0}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{\lambda} \sum_{\mu'=0}^{\lambda'} \mathcal{D}_{\lambda \mu'}^{\lambda' \mu} \left(\dot{\beta}_{\lambda'}^{\mu'} \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^{\mu}} + \dot{\gamma}_{\lambda'}^{\mu'} \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^{\mu}} \right). \tag{B1.11}$$

Ainsi nous retrouvons la même structure, que les coordonnées de forme soient complexes ou simplement réelles, et en effectuant l'abus conscient de notation

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \dot{\alpha}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \alpha_{\lambda}^{\mu}} = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \left[\dot{\beta}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \beta_{\lambda}^{\mu}} + \dot{\gamma}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \gamma_{\lambda}^{\mu}} \right], \tag{B1.12}$$


nous pouvons conserver tout le formalisme inchangé.

Bibliographie du chapitre 1

- [1] M. BORN & V. FOCK, « Beweis des Adiabatenatzes », Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, vol. 51, n° 3-4, 1928, pp. 165-180.
- [2] A. MESSIAH, « Mécanique quantique », Dunod, Paris, 1995.
- [3] B. DIU, C. GUTHMANN, D. LEDERER & B. ROULET, « Physique statistique », Hermann, Paris, 1989.
- [4] H. BERGSON, « Matière et mémoire », PUF, Paris, 1959, p. 280.
- [5] D. R. INGLIS, « Particle Derivation of Nuclear Rotation Properties Associated with a Surface Wave », Phys. Rev. **96**, 1059, 1954.
- [6] D. R. INGLIS, « Nuclear Moments of Inertia due to Nucleon Motion in a Rotating Well », Phys. Rev. **103**, 1786, 1956.
- [7] H. J. KRAPPE & K. POMORSKY, « Theory of Nuclear Fission », Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2012. (pp. 207-211)
- [8] W. GREINER & J. A. MARUHN, « Nuclear Models », Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1996.
- [9] J. DUDEK, W. DUDEK, E. RUCHOWSKA & J. SKALSKI, « Systematically too Low Values of the Cranking Model Collective Inertia Parameters », Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 294, 1980, pp. 341-350.

Chapitre 2

Interactions et symétries géométriques du noyau de l'atome

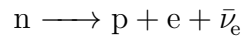
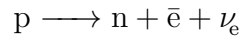
 LE NOYAU de l'atome est un objet quantique, et pourtant nous voyons, dans la première section, comment il est possible de traiter de la forme géométrique d'un noyau à l'aide des harmoniques sphériques. Cette description géométrique du noyau conduit à introduire des paramètres, les coordonnées de forme, dans le champ moyen. La résolution du mouvement individuel des nucléons dans le champ moyen est abordée dans la deuxième section et de la troisième à la cinquième section, nous précisons le contenu physique du champ moyen. La sixième section nous permet de montrer comment contraindre la description de la forme du noyau pour assurer la présence de certaines symétries, et rétroactivement nous montrons dans la septième section comment les symétries peuvent être utilisées pour simplifier l'ouvrage calculatoire. Enfin dans la huitième section, nous introduisons les symétries dites *de haut rang*, celle du tétraèdre et de l'octaèdre mais aussi pour la première fois celle de l'icosaèdre. Les conséquences immédiates de ces symétries sont exposées. Tout d'abord les degrés élevés de dégénérescence, jusqu'à six pour l'icosaèdre, qui favorisent l'apparition de sauts énergétiques (*gaps* en anglais) stabilisant le noyau dans ces symétries particulières. Ensuite l'accroissement de l'inertie collective par ces symétries inclinant le noyau à adopter plus de telles symétries. Pour cette étude du noyau, nous nous plaçons dans le référentiel du centre d'inertie du noyau et nous considérons que ce référentiel est galiléen.

2.1 La forme du noyau de l'atome

NOUS CONNAISSONS quatre interactions fondamentales, qui permettent de décrire tous les phénomènes actuellement connus dans la physique. Ces quatre interactions sont actives dans le noyau de l'atome. Cependant nous n'allons en garder que deux parmi les quatre. Nous oublions l'interaction gravitationnelle, dont l'intensité est négligeable, et nous ne prenons pas

†. « Nul n'entre ici s'il n'est géomètre. »

en compte l'interaction faible, qui est responsable des phénomènes de radioactivité β ou plus précisément des changements de saveurs entre nucléons

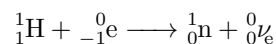
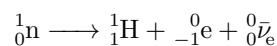
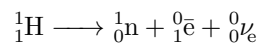


où p est le symbole du proton, n celui du neutron, e celui de l'électron, \bar{e} celui du positron, ν_e celui du neutrino électronique et $\bar{\nu}_e$ celui de l'antineutrino électronique¹. Nous ne conservons que l'interaction nucléaire ou interaction forte ainsi que l'interaction électromagnétique.

L'interaction électromagnétique est bien connue. Dans le cas du noyau, elle s'exprime essentiellement par une interaction répulsive agissant exclusivement entre les protons avec une portée infinie mais dont l'effet est écranté par le nuage électronique en dehors de l'atome. Il existe aussi une partie magnétique, qui est, la plupart du temps, négligeable dans le noyau. L'interaction électromagnétique ne permet pas d'assurer la cohésion du noyau et c'est même le contraire puisqu'elle a tendance à le disloquer. C'est ainsi que les physiciens ont été mis sur la piste de l'existence de l'interaction nucléaire.

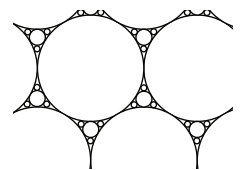
L'interaction nucléaire assure la cohésion du noyau, elle agit indifféremment sur les protons et les neutrons qui sont, pour cette interaction, des nucléons. Elle est bien plus intense que l'interaction électromagnétique mais de très courte portée. Cette courte portée signifie que l'espace dans lequel l'interaction est évanescence est plus restreint que la taille du noyau. Ces caractéristiques confèrent au noyau une structure extrêmement compacte² où la matière nucléaire, c'est-à-dire la localisation d'un grand nombre de nucléons, est incompressible. Ainsi, bien qu'en présence d'objets quantiques, nous sommes capables de définir, de manière pertinente, des concepts de surface et de volume. Ces concepts de la géométrie classique peuvent être pris comme point de départ de la théorie adiabatique du noyau, dans laquelle ils sont vus comme émergeant de la moyenne temporelle des mouvements rapides des nucléons. Ou bien, ils sont déduits des calculs de densité par la résolution de l'équation de SCHRÖDINGER. À cette échelle si infime de la matière, nous pouvons encore user de la bonne vieille géométrie des Grecs et considérer la forme d'un noyau. C'est de cette manière que nous glissons les symétries géométriques dans ce monde quantique. C'est dans ce sens que nous parlons de goutte quantique et non dans l'acception usuelle du modèle du noyau dit « de la goutte liquide ».

1. Il est aussi possible d'écrire ces équations



où ${}^1_1\text{H}$ est la notation du noyau ou du nucléide de l'hydrogène 1 et non celui de l'atome correspondant, ainsi ${}^1_1\text{H}$ est un simple proton non accompagné d'un électron.

2. La compacité d'un réseau cristallin, qui est le rapport du volume de matière au volume du cristal, atteint au mieux 74% dans le cas des réseaux cubiques faces centrées et hexagonal compact. Seul un remplissage apollonien est capable de faire mieux que l'interaction nucléaire grâce à sa structure fractale.



Si l'expression de l'interaction électromagnétique est parfaitement connue, il n'en est pas de même de l'interaction nucléaire. D'autre part la grande complication causée par la non-intégrabilité d'un système à plus de deux corps va nous inciter à considérer les nucléons pris dans un environnement moyen produit par le reste du noyau. C'est l'hypothèse du champ moyen que nous allons développer dans la section 2.2 p. 51. Cette hypothèse nécessite de définir une position du nucléon dans le champ moyen et plus précisément nous allons utiliser la distance entre le nucléon et la surface Σ du noyau. C'est pourquoi il nous faut un moyen de caractériser de manière simple, systématique et univoque la forme et la surface d'un noyau. Ce moyen simple nous est offert par la décomposition des fonctions sur la sphère, c'est-à-dire des fonctions des deux angles longitude ϕ et colatitude θ , sur la base des harmoniques sphériques.

Les harmoniques sphériques sont des fonctions complexes des angles θ et ϕ qui donnent la direction d'un point dans l'espace. Le détail des définitions et des théorèmes concernant les harmoniques sphériques est donné dans [10] (bibliographie p. 103). Nous ne rappelons ici que quelques propriétés sans démonstration, avec une convention usuelle en physique sur le facteur de normalisation :

$$Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2\lambda + 1}{4\pi} \frac{(\lambda - \mu)!}{(\lambda + \mu)!}} P_{\lambda\mu}(\cos \theta) e^{i\mu\phi}, \quad (2.1.1)$$

ou plus simplement

$$Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = Z_{\lambda\mu} P_{\lambda\mu}(\cos \theta) e^{i\mu\phi}, \quad (2.1.2)$$

en ayant posé les facteurs de normalisation

$$Z_{\lambda\mu} = \sqrt{\frac{2\lambda + 1}{4\pi} \frac{(\lambda - \mu)!}{(\lambda + \mu)!}}, \quad (2.1.3)$$

qui sont tous des coefficients réels. Dans ces expressions les $P_{\lambda\mu}$ sont les polynômes associés de LEGENDRE. Les harmoniques sphériques constituent une base orthonormale de l'espace de HILBERT des fonctions de carré sommable, et la relation d'orthonormalité s'écrit

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) Y_{\lambda'\mu'}^*(\theta, \phi) = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mu\mu'}. \quad (2.1.4)$$

Les dérivées partielles des harmoniques sphériques sont

$$\frac{\partial Y_{\lambda\mu}}{\partial \theta}(\theta, \phi) = -Z_{\lambda\mu} \sin \theta P'_{\lambda\mu}(\cos \theta) e^{i\mu\phi} \quad (2.1.5)$$

et

$$\frac{\partial Y_{\lambda\mu}}{\partial \phi}(\theta, \phi) = i\mu Z_{\lambda\mu} P_{\lambda\mu}(\cos \theta) e^{i\mu\phi}. \quad (2.1.6)$$

Nous ne donnons pas l'expression des polynômes associés de LEGENDRE mais simplement deux propriétés de parité utiles dans la suite :

$$P_{\lambda\mu}(-x) = (-1)^{\lambda-\mu} P_{\lambda\mu}(x) \quad (2.1.7)$$

et

$$P'_{\lambda\mu}(-x) = -(-1)^{\lambda-\mu} P'_{\lambda\mu}(x). \quad (2.1.8)$$

Les harmoniques sphériques $Y_{\lambda\mu}$ sont les coordonnées de tenseurs sphériques covariants Y_λ de rang λ :

$$Y_\lambda = \{Y_{\lambda\mu}; -\lambda \leq \mu \leq \lambda\}. \quad (2.1.9)$$

Le rang est indiqué par un indice en position basse et le caractère covariant ou contravariant est précisé par le second indice μ , qui est en position basse pour les tenseurs sphériques covariants et en position haute pour les tenseurs sphériques contravariants. Par exemple nous allons voir les coordonnées de forme qui constituent des tenseurs sphériques contravariants :

$$\alpha_\lambda = \{\alpha_\lambda^\mu; -\lambda \leq \mu \leq \lambda\}. \quad (2.1.10)$$

Nous rappelons une dernière propriété des tenseurs sphériques :

$$Y_{\lambda-\mu} = (-1)^\mu Y_{\lambda\mu}^*, \quad \alpha_\lambda^{-\mu} = (-1)^\mu (\alpha_\lambda^\mu)^*. \quad (2.1.11)$$

Ces relations sont des conséquences de la convention de phase de CONDON et SHORTLEY et elles vont nous permettre de donner une expression réelle du développement de la surface nucléaire. Nous allons maintenant expliquer le développement de la surface nucléaire.

Le noyau de l'atome est souvent imaginé comme un objet sphérique. Dans ce cas le repérage d'un point de la surface du noyau est naturellement donné en coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) par

$$\forall \theta, \phi, \quad r = R(\theta, \phi) = R_0. \quad (2.1.12)$$

Cependant il n'y a aucune raison de ne pas concevoir des formes diverses et variées pour le noyau de l'atome. D'ailleurs les expérimentateurs assignent volontiers une forme au noyau à partir de la mesure de la répartition de la charge et du magnétisme à l'intérieur du noyau. Ces répartitions sont décrites avec les moments multipolaires électromagnétiques. Et les physiciens franchissent un pas en affirmant que cela nous donne la forme du noyau.

THÉORÈME 5 :

Toute fonction réelle de θ et ϕ , et de carré sommable, se développe en une unique série des harmoniques sphériques

$$f(\theta, \phi) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} f_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi), \quad (2.1.13)$$

avec

$$f_\lambda^\mu = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi) f(\theta, \phi), \quad (2.1.14)$$

où les coefficients f_λ^μ constituent les composantes de tenseurs sphériques contravariants de rang λ afin d'assurer le caractère scalaire de la fonction à travers la contraction tensorielle

$$f(\theta, \phi) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} f_\lambda Y_\lambda(\theta, \phi), \quad (2.1.15)$$

où

$$f_\lambda Y_\lambda(\theta, \phi) = \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} f_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi). \quad (2.1.16)$$

Dans la situation que nous considérons, nous appelons *coordonnées de forme* les coefficients du développement de la déformation du noyau par rapport à la sphère et nous les notons α_λ^μ . Nous utilisons ce théorème en sens inverse. En effet, nous allons manier le développement et les coordonnées de forme comme des paramètres de contrôle de la forme du noyau. C'est pourquoi les coordonnées de forme, notées dans leur ensemble α , entrent comme variables des fonctions qui vont suivre. La distance d'un point de la surface du noyau à l'origine O du repère est donnée par

$$r = R(\theta, \phi; \alpha) = R_0 \left(1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \right). \quad (2.1.17)$$

La matière nucléaire étant incompressible, le volume du noyau est invariable sous l'effet de la déformation. Nous assurons cela en ajoutant dans l'expression de $R(\theta, \phi; \alpha)$ un facteur $c(\alpha)$ qui maintient ce volume constant quelle que soit la déformation³. Ainsi

$$R(\theta, \phi; \alpha) = R_0 c(\alpha) \left(1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \right). \quad (2.1.21)$$

DÉFINITION 3 :

Nous appelons forme du noyau

$$F(\theta, \phi; \alpha) = 1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi). \quad (2.1.22)$$

L'équation de la surface du noyau est

$$r = R(\theta, \phi; \alpha) = R_0 c(\alpha) F(\theta, \phi; \alpha), \quad (2.1.23)$$

et nous pouvons en donner une expression vectorielle

$$\vec{r} = \vec{R}(\theta, \phi; \alpha) = R(\theta, \phi; \alpha) \vec{n}(\theta, \phi), \quad (2.1.24)$$

où nous employons le vecteur unitaire radial

$$\vec{n}(\theta, \phi) = \sin \theta \cos \phi \vec{i} + \sin \theta \sin \phi \vec{j} + \cos \theta \vec{k}, \quad (2.1.25)$$

3. Le volume du noyau est celui d'une sphère de rayon R_0 :

$$\frac{4\pi}{3} R_0^3 = \int_V dV = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{R(\theta, \phi; \alpha)} r^2 dr = \frac{1}{3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta R^3(\theta, \phi; \alpha), \quad (2.1.18)$$

alors

$$4\pi = c^3(\alpha) \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta F^3(\theta, \phi; \alpha) \quad (2.1.19)$$

et

$$\frac{1}{c(\alpha)} = \sqrt[3]{\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta F^3(\theta, \phi; \alpha)}. \quad (2.1.20)$$

défini ici dans la base cartésienne orthonormée $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$. La forme F que nous venons d'introduire est une fonction réelle bien qu'elle soit exprimée à partir de grandeurs complexes α_λ^μ et $Y_{\lambda\mu}$. Nous allons construire une expression réelle de cette fonction en utilisant les propriétés données précédemment.

$$F(\theta, \phi; \alpha) = 1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \quad (2.1.26)$$

$$= 1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left(\alpha_\lambda^0 Y_{\lambda 0}(\theta, \phi) + \sum_{\mu=1}^{\lambda} (\alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) + \alpha_\lambda^{-\mu} Y_{\lambda-\mu}(\theta, \phi)) \right), \quad (2.1.27)$$

avec les relations (2.1.11) p. 48

$$F(\theta, \phi; \alpha) = 1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left(\alpha_\lambda^0 Y_{\lambda 0}(\theta, \phi) + \sum_{\mu=1}^{\lambda} (\alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) + (-1)^\mu (\alpha_\lambda^\mu)^* \times (-1)^\mu Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi)) \right) \quad (2.1.28)$$

$$= 1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left(\alpha_\lambda^0 Y_{\lambda 0}(\theta, \phi) + \sum_{\mu=1}^{\lambda} (\alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) + (\alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi))^*) \right) \quad (2.1.29)$$

$$= 1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left(\alpha_\lambda^0 Y_{\lambda 0}(\theta, \phi) + \sum_{\mu=1}^{\lambda} 2\text{Re}(\alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)) \right), \quad (2.1.30)$$

et du fait que

$$\text{Re}(\alpha_\lambda^{-\mu} Y_{\lambda-\mu}(\theta, \phi)) = \text{Re}(\alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)), \quad (2.1.31)$$

alors

$$F(\theta, \phi; \alpha) = 1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left(\alpha_\lambda^0 Y_{\lambda 0}(\theta, \phi) + \sum_{\mu=1}^{\lambda} \left(\text{Re}(\alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)) + \text{Re}(\alpha_\lambda^{-\mu} Y_{\lambda-\mu}(\theta, \phi)) \right) \right). \quad (2.1.32)$$

D'autre part

$$Y_{\lambda 0} = (-1)^0 Y_{\lambda 0}^*, \quad \alpha_\lambda^0 = (-1)^0 (\alpha_\lambda^0)^* \quad (2.1.33)$$

donc nous savons que

$$Y_{\lambda 0} = \text{Re} Y_{\lambda 0}, \quad \alpha_\lambda^0 = \text{Re} \alpha_\lambda^0. \quad (2.1.34)$$

LEMME 6 :

L'expression réelle de la forme est

$$F(\theta, \phi; \alpha) = 1 + \text{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi). \quad (2.1.35)$$

Il devient dès lors possible de glisser les symétries géométriques dans le noyau de l'atome et de les contrôler. Nous réalisons cette introduction à travers l'utilisation du champ moyen comme nous allons le préciser immédiatement.

2.2 Le champ moyen

LA DÉTERMINATION du mouvement du noyau en tant que collection de nucléons doit *a priori* se faire en résolvant l'équation de SCHRÖDINGER à A particules⁴, p. 13,

$$(1.2.2) \quad \hat{\mathcal{H}}(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_A, t) |\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \quad \text{où} \quad \hat{x}_i \equiv \left\{ \hat{r}_i, \hat{p}_i, \hat{s}_i, \hat{\eta}_i \right\},$$

et comme nous l'avons déjà expliqué au chapitre 1, nous remplaçons ce problème insoluble en général et difficilement soluble numériquement par un problème plus simple obtenu avec l'approximation adiabatique alliée à l'approximation de champ moyen. Ainsi

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_A, t) \rightarrow \hat{\mathcal{H}}(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_A; \alpha) = \sum_{i=1}^A \hat{H}_i(\hat{x}_i; \alpha) \quad \text{avec} \quad \alpha = \alpha(t), \quad (2.2.1)$$

où α est l'ensemble des coordonnées de forme, lentement dépendantes du temps, qui décrivent la forme du noyau au travers de l'expression, p. 49,

$$(2.1.21) \quad R(\theta, \phi; \alpha) = R_0 c(\alpha) \left(1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda}^{\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \right).$$

L'expression formelle du hamiltonien de champ moyen est identique pour tous les nucléons et la résolution du problème à A particules est remplacée par celle d'un problème à une particule prise dans le champ moyen

$$\hat{H}(\hat{x}, \alpha) |\psi_{\kappa}(\alpha)\rangle = e_{\kappa}(\alpha) |\psi_{\kappa}(\alpha)\rangle. \quad (2.2.2)$$

Les états solutions du problème à A particules sont reconstitués à partir du produit tensoriel des états individuels et indépendants en formant des multivecteurs d'états à l'aide du produit extérieur, ou bien, dit autrement, en formant un déterminant de SLATER afin de tenir compte de l'indiscernabilité des particules nucléaires. Cependant, tous les nucléons ne sont pas indiscernables puisque nous distinguons les protons et les neutrons. Pour tenir compte de cette discernabilité partielle, il faut construire séparément un multivecteur d'états pour les Z protons et un autre pour les $A - Z$ neutrons. Ensuite les deux multivecteurs d'états sont combinés par un simple produit tensoriel

$$|\Psi_k(\alpha)\rangle = \bigotimes_{\eta=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |\Psi_{k_{\eta}}(\alpha)\rangle = |\Psi_{k_p}(\alpha)\rangle \otimes |\Psi_{k_n}(\alpha)\rangle \quad (2.2.3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{Z!}} \hat{\mathcal{A}} \left\{ \bigotimes_{i_p=1}^Z |\psi_{\kappa_{i_p}}(\alpha)\rangle \right\} \otimes \frac{1}{\sqrt{(A-Z)!}} \hat{\mathcal{A}} \left\{ \bigotimes_{i_n=1}^{A-Z} |\psi_{\kappa_{i_n}}(\alpha)\rangle \right\} \quad (2.2.4)$$

4. Il est d'usage de noter l'isospin avec les lettres t ou T . Cependant ces lettres sont déjà utilisées abondamment pour le temps et l'énergie cinétique. C'est pourquoi nous utilisons la lettre η pour l'isospin. Pour le neutron $\eta = \frac{1}{2}$ et pour le proton $\eta = -\frac{1}{2}$.

$$= \frac{1}{\sqrt{Z!}} \bigwedge_{i_p=1}^Z |\psi_{\kappa_{i_p}}(\alpha)\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{(A-Z)!}} \bigwedge_{i_n=1}^{A-Z} |\psi_{\kappa_{i_n}}(\alpha)\rangle, \quad (2.2.5)$$

où $\hat{\mathcal{A}}$ est l'opérateur d'antisymétrisation et \bigwedge est le symbole du produit extérieur⁵. Dans la suite, nous considérons donc un traitement séparé des protons et des neutrons

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_p + \hat{\mathcal{H}}_n, \quad (2.2.6)$$

et nous ne précisons le type de nucléons que lorsque c'est nécessaire. Le nombre de nucléons du type considéré est noté N et vaut Z dans le cas des protons et $A - Z$ dans le cas des neutrons.

Nous disposons aussi d'une construction des états de multiparticules fondée sur *la représentation en nombre de particules*, ou *écriture de seconde quantification*. Nous utilisons ce formalisme directement sans rappeler plus avant ses prémisses. Nous notons \hat{c}_κ^+ le créateur de particules dans l'état $|\psi_\kappa\rangle$ d'énergie e_κ par son action sur l'état vide de particules $|\emptyset\rangle$. Nous notons \hat{c}_κ l'annihilateur de particules pour le même état. Ainsi

$$|\psi_\kappa\rangle = \hat{c}_\kappa^+ |\emptyset\rangle \quad \text{et} \quad \hat{c}_\kappa |\psi_\kappa\rangle = |\emptyset\rangle, \quad (2.2.7)$$

et aussi du fait que les nucléons sont des fermions, la règle d'exclusion de Wolfgang PAULI exige que

$$\hat{c}_\kappa^+ |\psi_\kappa\rangle = 0, \quad (2.2.8)$$

et enfin l'annihilation du vide donne

$$\hat{c}_\kappa |\emptyset\rangle = 0. \quad (2.2.9)$$

THÉORÈME 6 :

Dans le formalisme de seconde quantification, un opérateur à un corps \hat{O} s'écrit

$$\hat{O} = \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{N}^*} \langle \psi_\mu | \hat{O} | \psi_\nu \rangle \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\nu, \quad (2.2.10)$$

et en particulier le hamiltonien à N particules

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{N}^*} \langle \psi_\mu | \hat{H} | \psi_\nu \rangle \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\nu = \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{N}^*} e_\nu \delta_{\mu\nu} \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\nu = \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\mu. \quad (2.2.11)$$

Le hamiltonien à N particules est décomposé à l'aide du hamiltonien des particules individuelles, celui de champ moyen.

Un état multiparticule à N particules indépendantes s'écrit simplement comme un produit de N opérateurs de création dans les N états occupés agissant sur l'état vide de particules. Il

5. Une définition imparfaite mais brève consiste à dire que le produit extérieur de deux vecteurs \vec{a} et \vec{b} est la combinaison antisymétrique des produits tensoriels des deux vecteurs : $\vec{a} \wedge \vec{b} = \vec{a} \otimes \vec{b} - \vec{b} \otimes \vec{a}$. Pour trois vecteurs : $\vec{a} \wedge \vec{b} \wedge \vec{c} = \vec{a} \otimes \vec{b} \otimes \vec{c} + \vec{b} \otimes \vec{c} \otimes \vec{a} + \vec{c} \otimes \vec{a} \otimes \vec{b} - \vec{a} \otimes \vec{c} \otimes \vec{b} - \vec{b} \otimes \vec{a} \otimes \vec{c} - \vec{c} \otimes \vec{b} \otimes \vec{a}$ qui se généralise en dimension quelconque. De la même façon, $|\psi\rangle \wedge |\phi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle - |\phi\rangle \otimes |\psi\rangle = |\psi, \phi\rangle - |\phi, \psi\rangle$.

n'y a plus besoin de se soucier de l'antisymétrisation. Ainsi l'état fondamental à N particules indépendantes qui correspond à l'occupation des N premiers états est

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{n=1}^N \hat{c}_n^+ |\emptyset\rangle, \quad (2.2.12)$$

et un état excité j , par exemple à une particule et un trou, correspond, partant de l'état fondamental, au transfert d'une particule d'un état $|\psi_\iota\rangle$ (ι est la lettre grecque *iota*) avec $\iota \leq N$ vers un état $|\psi_\kappa\rangle$ avec $\kappa > N$

$$|\Psi_j\rangle = |\Psi_{\iota \rightarrow \kappa}\rangle = \hat{c}_\kappa^+ \hat{c}_\iota |\Psi_0\rangle. \quad (2.2.13)$$

Dans ce formalisme, il devient extrêmement aisé de calculer l'énergie d'un état multiparticule à partir des états de particules individuelles. Voyons le cas de l'état fondamental et celui de l'état excité à une particule et un trou

$$\mathcal{E}_0 = \langle \Psi_0 | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_0 \rangle = \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_{\mu} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\mu} | \Psi_0 \rangle \quad (2.2.14)$$

et

$$\mathcal{E}_{\iota \rightarrow \kappa} = \langle \Psi_{\iota \rightarrow \kappa} | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_{\iota \rightarrow \kappa} \rangle = \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_{\mu} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\kappa} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\mu} \hat{c}_{\kappa}^+ \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle. \quad (2.2.15)$$

THÉORÈME 7 :

L'énergie de l'état fondamental pour N particules indépendantes est ⁶

$$\mathcal{E}_0 = \sum_{\mu=1}^N e_{\mu} \quad (2.2.16)$$

et l'énergie de l'état excité à une particule κ et un trou ι pour N particules indépendantes est

$$\mathcal{E}_{\iota \rightarrow \kappa} = \mathcal{E}_0 - e_{\iota} + e_{\kappa}. \quad (2.2.17)$$

~~~~~

Toute cette construction reste pour le moment une construction en puissance puisque les états propres du hamiltonien de champ moyen ne sont pas encore connus. Pour obtenir une construction en acte, il faut préciser l'expression de ce hamiltonien. Le hamiltonien de champ moyen est la somme d'une énergie cinétique et d'énergies potentielles :

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}. \quad (2.2.18)$$

L'expression de l'énergie cinétique est

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m(\eta)} \Delta, \quad (2.2.19)$$

---

6. Voir l'annexe A<sub>2</sub> p. 75.

avec le laplacien

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (2.2.20)$$

Il faut maintenant préciser le contenu de l'énergie potentielle ; c'est pourquoi nous devons faire le bilan des interactions à l'œuvre dans le noyau et qui ont été mises en évidence par une centaine d'années d'expérimentation en physique nucléaire.

## 2.3 L'interaction électromagnétique

LA COMPOSITION du noyau avec des particules chargées que sont les protons implique logiquement la présence de l'interaction électromagnétique dans le noyau. La partie électrique fut entièrement déterminée en 1785 par Charles-Augustin COULOMB et c'est pourquoi on parle d'interaction coulombienne. La partie magnétique, quant à elle, fut précisée en 1820 par André-Marie AMPÈRE. Dès que la densité de charge électrique est connue, l'interaction coulombienne est parfaitement déterminée.

### PROPOSITION 6 :

La densité de charge électrique dans le noyau est uniforme et indépendante de sa forme

$$\rho(\vec{r}; \alpha) = \begin{cases} \rho_0 = \frac{(Z-1)e}{\frac{4}{3}\pi R_0^3} & \text{pour } \vec{r} \in \mathcal{V}(\Sigma), \\ 0 & \text{pour } \vec{r} \notin \mathcal{V}(\Sigma), \end{cases} \quad (2.3.1)$$

où  $\rho_0$  est la densité de charge de tous les protons, sauf celui dont nous considérons le mouvement, répartie uniformément dans tout le volume du noyau  $\mathcal{V}(\Sigma)$ .



Nous avons alors l'expression de l'énergie associée à cette interaction pour un nucléon par intégration sur tout le volume

$$V_{\text{Coul}}(\vec{r}; \alpha) = \left(\frac{1}{2} - \eta\right) \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \frac{e\rho(\vec{r}'; \alpha)}{4\pi\epsilon_0 \|\vec{r} - \vec{r}'\|} \quad (2.3.2)$$

$$= \left(\frac{1}{2} - \eta\right) \frac{3(Z-1)e^2}{16\pi^2\epsilon_0 R_0^3} \int_{\mathcal{V}(\Sigma)} \frac{d^3r'}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|}. \quad (2.3.3)$$

Maintenant il est certain que l'interaction coulombienne n'est pas la seule interaction électromagnétique active dans le noyau. En particulier et à l'instar d'un électron dans un atome, nous pouvons envisager une interaction spin-orbite électromagnétique entre le moment magnétique orbital et le moment de spin d'un proton

$$V_{\text{Amp}}(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}; \alpha) = \frac{g_\ell(\eta)g_s(\eta)}{4m^2(\eta)c^2} \left( \vec{\nabla} V_{\text{Coul}}(\vec{r}; \alpha) \wedge \vec{p} \right) \cdot \vec{s}. \quad (2.3.4)$$

Toutefois, au niveau du noyau, cette interaction reste une correction faible. Nous la négligeons pour la suite. Pourtant nous conservons l'idée d'un couplage spin-orbite formellement équivalent mais pour l'interaction nucléaire.

## 2.4 L'interaction nucléaire centrale

À PARTIR de 1919, avec la découverte du proton et de la structure du noyau de l'atome par Ernest RUTHERFORD, l'idée de l'existence d'une interaction nucléaire va progressivement émerger afin d'expliquer que les noyaux n'explorent pas sous l'effet de la répulsion électrique des protons. Nous savons aujourd'hui que les nucléons sont également structurés et constitués par des quarks. L'interaction nucléaire dans le noyau (sciemment nous ne parlons pas d'interaction entre les nucléons) est un résidu de l'interaction nucléaire entre les quarks. À l'heure actuelle son expression n'est pas complètement connue, mais nous possédons ses caractéristiques principales à savoir qu'elle agit sur les nucléons qui tentent de quitter le noyau avec une grande vigueur<sup>7</sup> mais sur une très courte portée. Les nucléons sont pris dans un puits dans lequel ils jouissent d'une grande liberté mais dont ils ne peuvent que très difficilement s'échapper. Pour rendre compte de ces caractéristiques, nous utilisons comme point de départ l'expression empirique de l'énergie potentielle de Roger WOODS et David SAXON donnée dans le cadre de la symétrie sphérique

$$V_{\text{WS}}(r) = \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R_0}{a_0}\right)}. \quad (2.4.1)$$

Dans cette expression  $V_0$  est la profondeur du puits nucléaire,  $R_0$  le rayon nucléaire et  $a_0$  l'épaisseur de la surface nucléaire qui introduit la notion de peau nucléaire. Le rayon nucléaire est le rayon du noyau sphérique et il est lié au rayon  $r_0$  d'un nucléon :

$$R_0 = r_0 A^{\frac{1}{3}} \quad (2.4.2)$$

signifiant que la matière nucléaire est incompressible. Pour fixer les idées sur les ordres de grandeur :

$$V_0 \approx 8,0 \text{ pJ} \approx 50 \text{ MeV}, \quad (2.4.3)$$

$$a_0 \approx 0,5 \text{ fm}, \quad (2.4.4)$$

$$r_0 \approx 1,2 \text{ fm}. \quad (2.4.5)$$

Nous pouvons examiner quelques valeurs prises par cette énergie potentielle

$$V_{\text{WS}}(R_0) = 0,50V_0, \quad (2.4.6)$$

$$V_{\text{WS}}\left(R_0 - \frac{a_0}{2}\right) = 0,62V_0, \quad (2.4.7)$$

$$V_{\text{WS}}\left(R_0 + \frac{a_0}{2}\right) = 0,38V_0 = V_{\text{WS}}\left(R_0 - \frac{a_0}{2}\right) - 0,50V_{\text{WS}}(R_0), \quad (2.4.8)$$

$$V_{\text{WS}}(R_0 - 2.2a_0) = 0,90V_0, \quad (2.4.9)$$

$$V_{\text{WS}}(R_0 + 2.2a_0) = 0,10V_0 \quad (2.4.10)$$

qui nous font comprendre l'image géométrique du noyau induite par l'expression de cette énergie potentielle. Le volume du noyau est délimité par une surface  $\Sigma$  d'énergie potentielle  $0,50V_0$  mais

---

7. Un nucléon est capable d'arrêter un autre nucléon lancé vers lui à la vitesse de  $10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  sur une distance de  $10^{-15} \text{ m}$ . La superglu est battue à plate couture par l'interaction nucléaire.

cette surface n'est pas d'épaisseur infime comme l'exige EUCLIDE, c'est une surface physique agissant telle une peau d'épaisseur  $a_0$  car l'énergie potentielle perd 50 % de sa valeur sur cette épaisseur autour de la limite du volume du noyau.

Dans cette expression  $r - R_0$  représente la distance algébrique la plus courte entre le nucléon et la surface nucléaire sphérique. Nous généralisons l'expression à toute forme du noyau en remplaçant, dans l'expression de l'énergie potentielle, la distance algébrique  $r - R_0$  par  $\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)$ , la distance la plus courte entre le nucléon et la surface nucléaire  $\Sigma$ .

**PROPOSITION 7 :**

L'énergie potentielle de l'interaction nucléaire dépend de la variable vectorielle  $\vec{r}$  et aussi des variables collectives que sont les coordonnées de forme  $\alpha_\lambda^\mu$  :

$$V_{\text{WS}}(\vec{r}; \alpha) = \frac{V_0(\eta)}{1 + \exp\left(\frac{\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)}{a_0(\eta)}\right)} = \frac{V_0(\eta)}{1 + \exp\left(\frac{R_0(\eta)\text{Dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)}{a_0(\eta)}\right)}. \quad (2.4.11)$$

La définition de la distance entre un nucléon et la surface du noyau est évidente dans le cas où le noyau est sphérique. Elle l'est beaucoup moins dans les autres cas. Considérons un nucléon dont la position est repérée par ses coordonnées sphériques  $\vec{r} = (r, \vartheta, \varphi)$  et considérons aussi un point de la surface nucléaire  $\Sigma$  repéré également par ses coordonnées sphériques  $(R(\theta, \phi; \alpha), \theta, \phi)$ . La distance entre ces deux points est parfaitement définie :

$$\text{dist}(\vec{r}, \theta, \phi; \alpha) = \sqrt{\left[\vec{r} - \vec{R}(\theta, \phi; \alpha)\right]^2}. \quad (2.4.12)$$

Nous définissons la distance entre le nucléon situé en  $\vec{r}$  et la surface nucléaire  $\Sigma$  comme la distance minimale entre ce point et les points de la surface nucléaire, ainsi :

$$\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha) = \min_{\{\theta, \phi\}} \text{dist}(\vec{r}, \theta, \phi; \alpha) = \text{dist}(\vec{r}, \theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha). \quad (2.4.13)$$

Nous notons les angles de la surface du point conduisant au minimum  $(\theta_\alpha, \phi_\alpha)$ . Ainsi l'expression littérale de cette distance est

$$\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha) = \sqrt{r^2 + R^2(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) - 2\vec{r} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha)R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)}. \quad (2.4.14)$$

Il est difficile de donner une expression littérale plus précise car, dans le cas général d'une forme quelconque, les angles  $(\theta_\alpha, \phi_\alpha)$  ne sont pas connus analytiquement mais obtenus par une procédure de minimisation numérique.

À ce stade, seule une première partie de l'interaction nucléaire est définie, il manque la partie provenant du spin-orbite.

## 2.5 L'interaction spin-orbite nucléaire

CONTRAIREMENT à l'interaction spin-orbite électromagnétique, nous ne disposons pas d'équivalent de la charge électrique et du moment magnétique pour l'interaction nucléaire. Nous



savons qu'une théorie quantique relativiste fondée sur l'équation de DIRAC conduit à considérer une interaction spin-orbite nucléaire dans le même cadre formel que l'interaction spin-orbite électromagnétique. Cela nous conduit à introduire à l'instar de Maria GOEPPERT-MAYER une interaction spin-orbite nucléaire de champ moyen.

**PROPOSITION 8 :**

L'énergie potentielle de l'interaction spin-orbite nucléaire est

$$V_{\text{GM}}(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}; \alpha) = \lambda_{\text{so}}(\eta) \left( \vec{\nabla} V_{\text{WS}}^{\text{so}}(\vec{r}; \alpha) \wedge \vec{p} \right) \cdot \vec{s}, \quad (2.5.1)$$

avec

$$V_{\text{WS}}^{\text{so}}(\vec{r}; \alpha) = \frac{V_{\text{so}}(\eta)}{1 + \exp\left(\frac{\text{dist}_{\Sigma^{\text{so}}}(\vec{r}; \alpha)}{a_{\text{so}}(\eta)}\right)} = \frac{V_{\text{so}}(\eta)}{1 + \exp\left(\frac{R_{\text{so}}(\eta) \text{Dist}_{\Sigma}(\vec{r}; \alpha)}{a_{\text{so}}(\eta)}\right)}, \quad (2.5.2)$$

où nous avons admis une liberté plus grande pour le spin-orbite nucléaire par rapport au spin-orbite électromagnétique, puisque l'énergie potentielle dont nous prenons le gradient est l'énergie potentielle nucléaire d'origine, mais avec une surface associée au spin-orbite modifiée par une homothétie de facteur  $\frac{R_{\text{so}}}{R_0}$ .

Nous avons donc quatorze constantes relatives à l'interaction forte :  $V_0, V_{\text{so}}, R_0, R_{\text{so}}, a_0, a_{\text{so}}$  et  $\lambda_{\text{so}}$  pour les protons et les neutrons. La seule interaction non locale non négligeable est donc cette interaction spin-orbite nucléaire, qui doit causer une énergie potentielle tenseur

$$V_{\text{ten}}(\vec{r}, \vec{s}; \alpha) = -\frac{\lambda_{\text{so}}^2(\eta) m(\eta)}{2} \left( \vec{s} \wedge \vec{\nabla} V_{\text{WS}}^{\text{so}}(\vec{r}; \alpha) \right)^2, \quad (2.5.3)$$

comme nous allons le voir au chapitre 5 p. 200. La contribution de cette énergie a toujours été omise et nous allons faire de même.

Maintenant que le cadre du champ moyen est établi, nous allons y glisser effectivement les symétries géométriques en déterminant comment les coordonnées de forme sont contraintes par les symétries que nous choisissons.

## 2.6 Introduction des symétries

DANS SON cours de physique, Richard FEYNMAN cite une définition donnée par Hermann WEYL à propos de la symétrie. Cette définition est très pragmatique et très physique.

**DÉFINITION 4 :**

Un objet est symétrique s'il existe quelque chose que nous puissions lui faire de telle sorte qu'après l'avoir fait, il apparaisse de la même manière qu'avant. Ce quelque chose est appelé est une opération de symétrie.

Nous allons maintenant considérer la possibilité que la forme du noyau puisse posséder certaines symétries. Cela signifie qu'en effectuant une opération de symétrie sur la forme, nous retrouvons encore la même forme. Chaque forme de noyau est associée à un groupe de symétries qui est l'ensemble des opérations de symétrie qui laissent la forme invariante. Les opérations de symétrie

géométriques à notre disposition sont l'identité, l'inversion ou symétrie centrale, les rotations autour de divers axes d'ordre 2, 3, 4, 5, 6 et infini, les réflexions par rapport à divers plans, et les rotations-réflexions<sup>8</sup> autour de divers axes d'ordre 2, 3, 4, 5, 6, 8. Nous excluons toute translation puisque nous nous sommes placés dans le référentiel d'inertie du noyau.

Soit  $\hat{\mathcal{O}}$  un opérateur de symétrie du groupe associé à la forme. L'opérateur agit sur la forme en envoyant le point de la surface du noyau dans la direction  $(\theta, \phi)$  en un nouveau point de la surface dans la direction  $(\theta', \phi')$ .

**COROLLAIRE 1 :**

Si  $\hat{\mathcal{O}}$  est un opérateur de symétrie du groupe associé à la forme, alors

$$\hat{\mathcal{O}}F(\theta, \phi; \alpha) = F(\theta', \phi'; \alpha) \quad (2.6.1)$$

et

$$\forall \theta, \phi, \quad F(\theta', \phi'; \alpha) = F(\theta, \phi; \alpha). \quad (2.6.2)$$

~~~~~

Pour exprimer la forme, nous utilisons un développement en une série d'harmoniques sphériques. En effet, le grand avantage de recourir aux harmoniques sphériques est qu'ils⁹ sont des tenseurs sphériques irréductibles.

LEMME 7 :

Soit $\hat{\mathcal{O}}$ un opérateur de symétrie appartenant à $O(3)$, alors l'action de cet opérateur sur un harmonique sphérique de rang λ donne une combinaison linéaire d'harmoniques sphériques de rang λ

$$\hat{\mathcal{O}}Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = \sum_{\nu=-\lambda}^{\lambda} A_{\lambda\mu}^{\nu}(\mathcal{O})Y_{\lambda\nu}(\theta, \phi). \quad (2.6.3)$$

~~~~~

Nous allons utiliser le corollaire 1 et le lemme 7 pour développer quelques cas particuliers et voir que le fait d'imposer l'existence d'une opération de symétrie contraint la forme du noyau, ce qui s'exprime par des relations entre les coordonnées de forme  $\alpha_{\lambda}^{\mu}$ . À titre d'exemple, nous envisageons les réflexions par rapport à l'un des trois plans de base  $(xOy)$ ,  $(yOz)$  et  $(zOx)$ , l'inversion par rapport à l'origine  $O$  et la rotation d'un angle  $\varphi$  autour d'un axe de direction  $(\psi, \vartheta)$ . Dans chaque cas nous désignons par  $\vec{r}$  un point dans la direction  $(\theta, \phi)$  et par  $\vec{r}'$  le point symétrique par rapport à l'opération considérée et qui est dans la direction  $(\theta', \phi')$ . Quand la forme d'un noyau possède une telle symétrie,

$$(2.6.2) \quad \forall \theta, \phi, \quad F(\theta', \phi'; \alpha) = F(\theta, \phi; \alpha),$$

qui devient en utilisant le lemme 6 p. 50 sur l'expression réelle de la forme

$$\operatorname{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda}^{\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta', \phi') = \operatorname{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda}^{\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi). \quad (2.6.4)$$

---

8. Une rotation-réflexion est la composition commutative d'une rotation autour d'un axe et de la réflexion par rapport à un plan perpendiculaire à l'axe de rotation. Il n'existe pas de nom unique pour cette opération de symétrie, on trouve aussi rotoréflexion ou antirotation.

9. Harmonique est un nom masculin.

**THÉORÈME 8 : CONTRAINTES SUR LES COORDONNÉES DE FORME**<sup>10</sup>

Si certains éléments de symétrie sont présents dans la forme d'un noyau alors les coordonnées de forme suivent certaines contraintes.

— Si le plan  $(xOy)$  est un élément de symétrie alors

$$\alpha_\lambda^\mu = 0 \quad \text{pour } \lambda - \mu \text{ impair}; \quad (2.6.5)$$

— si le plan  $(yOz)$  est un élément de symétrie alors

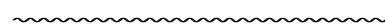
$$\operatorname{Re} \alpha_\lambda^\mu = 0 \quad \text{pour } \mu \text{ impair} \quad \text{et} \quad \operatorname{Im} \alpha_\lambda^\mu = 0 \quad \text{pour } \mu \text{ pair}; \quad (2.6.6)$$

— si le plan  $(zOx)$  est un élément de symétrie alors

$$\alpha_\lambda^\mu \in \mathbb{R}; \quad (2.6.7)$$

— si le point  $O$  est un élément de symétrie alors

$$\alpha_\lambda^\mu = 0 \quad \text{pour } \lambda \text{ impair}. \quad (2.6.8)$$



Nous venons de voir le cas de quelques éléments de symétrie particulièrement simples à caractériser. Nous voulons aussi voir le cas très intéressant des rotations. Considérons la symétrie de rotation d'angle  $\varphi$  autour d'un axe dans la direction  $(\psi, \vartheta)$ . Il devient assez compliqué de rechercher un lien entre les angles  $(\theta, \phi)$  et  $(\theta', \phi')$ . Aussi utilisons-nous le lemme 7 p. 58 sur l'irréductibilité des harmoniques sphériques, en sachant que dans le cas des rotations, les coefficients de la combinaison linéaire sont les éléments d'une matrice  $D$  d'Eugene WIGNER. Ainsi

$$Y_{\lambda\mu}(\theta', \phi') = \sum_{\nu=-\lambda}^{\lambda} D_{\nu\mu}^\lambda(\psi, \vartheta, \varphi) Y_{\lambda\nu}(\theta, \phi). \quad (2.6.9)$$

Alors la relation, p. 58,

$$(2.6.2) \quad \forall \theta, \phi, \quad F(\theta', \phi'; \alpha) = F(\theta, \phi; \alpha),$$

devient

$$\operatorname{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu \sum_{\nu=-\lambda}^{\lambda} D_{\nu\mu}^\lambda(\psi, \vartheta, \varphi) Y_{\lambda\nu}(\theta, \phi) = \operatorname{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi), \quad (2.6.10)$$

ou encore

$$\operatorname{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\nu=-\lambda}^{\lambda} Y_{\lambda\nu}(\theta, \phi) \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu [D_{\nu\mu}^\lambda(\psi, \vartheta, \varphi) - \delta_{\nu\mu}] = 0. \quad (2.6.11)$$

Nous pouvons voir ici un problème aux valeurs propres puisque les termes qui s'annulent sont tels que  $\alpha_\lambda$  soit vecteur propre de la matrice  $D^\lambda(\psi, \vartheta, \varphi)$  avec la valeur propre 1. Les autres coordonnées de forme doivent nécessairement être nulles.

---

10. Voir à l'annexe B<sub>2</sub> p. 79.

**THÉORÈME 9 :**

Si la symétrie de rotation d'angle  $\varphi$  autour d'un axe dans la direction  $(\psi, \vartheta)$  s'applique, alors les coordonnées de forme telles que  $\alpha_\lambda$  n'est pas un vecteur propre associé à la valeur propre 1 de la matrice de WIGNER  $D^\lambda(\psi, \vartheta, \varphi)$  doivent être nulles. ~~~~~

Nous allons donner un exemple très simple où les matrices de WIGNER sont déjà diagonales, la rotation autour de l'axe  $z$  d'un angle de  $\pi$  rad. Dans ce cas, les angles d'EULER sont

$$\psi = 0, \quad \vartheta = 0, \quad \varphi = \pi \text{ rad.} \quad (2.6.12)$$

Voyons les matrices de WIGNER pour  $\lambda = 2$  et  $\lambda = 3$  :

$$D^2(0, 0, \pi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (2.6.13)$$

dont les vecteurs propres associés à la valeur propre 1 sont

$$\alpha_2 = \begin{bmatrix} \alpha_2^{-2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha_2^0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \alpha_2^2 \end{bmatrix}, \quad (2.6.14)$$

et

$$D^3(0, 0, \pi) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (2.6.15)$$

dont les vecteurs propres associés à la valeur propre 1 sont

$$\alpha_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha_3^{-2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \alpha_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \alpha_3^0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \alpha_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \alpha_3^2 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.6.16)$$

Plus généralement, si la rotation de  $\pi$  rad autour de l'axe  $z$  est une opération de symétrie du groupe de symétries de la forme du noyau, il faut que

$$\alpha_\lambda^\mu = 0 \quad \text{pour } \mu \text{ impair.} \quad (2.6.17)$$

Nous sommes donc en mesure d'établir une contrainte sur les coordonnées de forme pour chaque opération de symétrie que nous aurions à envisager. Pour un groupe de symétries, nous allons aboutir à un ensemble de contraintes qui nous assure le contrôle sur la symétrie de la forme du noyau. Juste avant de voir cela, nous nous tournons rapidement vers un usage plus pragmatique de la symétrie.

## 2.7 Plans de symétries et distance au noyau

SONGEANT à la symétrie bilatérale, MONTESQUIEU disait :

« La raison qui fait que la symétrie plaît à l'âme, c'est qu'elle lui épargne de la peine, qu'elle la soulage et qu'elle coupe pour ainsi dire l'ouvrage par la moitié. »

Et en effet, nous utilisons aussi la symétrie pour réduire notre ouvrage calculatoire. Nous avons introduit au chapitre 1 l'approximation du champ moyen où la position d'un nucléon dans le champ moyen est déterminante. Cela signifie qu'il faut calculer la distance entre un nucléon situé en  $\vec{r}$  et la surface  $\Sigma$  du noyau. Or, la distance entre la surface  $\Sigma$  du noyau et le nucléon est la distance minimale correspondant au point de la surface situé en  $(\theta_\alpha, \phi_\alpha)$

$$\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha) = \sqrt{\left[ \vec{r} - \vec{R}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) \right]^2}, \quad (2.7.1)$$

alors avec l'équation (2.1.21) p. 49

$$\vec{R}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) = R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha), \quad (2.7.2)$$

et avec l'équation (2.1.25) p. 49

$$\vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) = \sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha \vec{i} + \sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha \vec{j} + \cos \theta_\alpha \vec{k}, \quad (2.7.3)$$

l'expression de la distance devient, p. 56,

$$(2.4.14) \quad \text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha) = \sqrt{r^2 + R^2(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) - 2\vec{r} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)}.$$

Lorsqu'un ou plusieurs plans de symétries sont présents, il doit exister une relation simple entre la distance pour un nucléon situé en  $\vec{r}$ ,  $\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)$  et celle pour un nucléon situé symétriquement en  $\vec{r}'$ ,

$$\text{dist}_\Sigma(\vec{r}'; \alpha) = \sqrt{r'^2 + R^2(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha; \alpha) - 2\vec{r}' \cdot \vec{n}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) R(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha; \alpha)}. \quad (2.7.4)$$

L'existence d'une telle relation nous permet d'éviter des calculs fastidieux. Or, il est clair que dans cette expression

$$r' = r, \quad R(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha; \alpha) = R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha). \quad (2.7.5)$$

Il reste à vérifier l'invariance de

$$\vec{r} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) = x \sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha + y \sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha + z \cos \theta_\alpha. \quad (2.7.6)$$

Nous pouvons montrer<sup>11</sup> qu'avec chacun des plans de symétrie de base

$$\vec{r}' \cdot \vec{n}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = \vec{r} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha). \quad (2.7.7)$$

---

11. Voir à l'annexe C<sub>2</sub> p. 83.

**THÉORÈME 10 :**

Quels que soient les plans de symétrie présents, la distance entre la surface nucléaire et un nucléon est égale à la distance entre la surface nucléaire et le nucléon symétrique par un plan de symétrie de la surface nucléaire

$$\text{dist}_\Sigma(\vec{r}'; \alpha) = \text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha). \quad (2.7.8)$$



Le résultat que nous obtenons est sans surprise et heureusement en accord avec le principe de symétrie. Cependant nous allons devoir également calculer des dérivées de cette distance par rapport à des coordonnées de forme. Nous ne pouvons pas inférer sans preuve un comportement identique pour les dérivées de la distance. Nous allons d'ailleurs voir que ce serait faux.

À partir de maintenant, nous réduisons la généralité de la situation en supposant que le plan de symétrie ( $zOx$ ) est toujours présent. Ainsi, nous savons d'après l'équation (2.6.7) du théorème 8 p. 59 que les coordonnées de forme sont purement réelles. Derechef nous évitons la confrontation à la dérivation par rapport à une variable complexe qui est un problème ardu. Désormais l'expression de la forme est

$$F(\theta, \phi; \alpha) = 1 + \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\rho=-\nu}^{\nu} \alpha_\nu^\rho \text{Re } Y_{\nu\rho}(\theta, \phi), \quad \alpha_\nu^\rho \in \mathbb{R}. \quad (2.7.9)$$

Nous calculons sans difficulté la dérivée de la distance par rapport à une coordonnée de forme

$$\begin{aligned} \frac{\partial \text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} = \frac{1}{\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)} & \left[ (R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) - \vec{r} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha)) \frac{\partial}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} [R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)] \right. \\ & \left. - \vec{r} \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} [\vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha)] R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) \right], \end{aligned} \quad (2.7.10)$$

mais il faut prendre garde que  $\theta_\alpha$  et  $\phi_\alpha$  sont fonctions de  $\alpha$  donc

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} [\vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha)] = \frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) \frac{\partial \theta_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} + \frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}}, \quad (2.7.11)$$

et

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} [R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)] = \frac{\partial R}{\partial \alpha_{\lambda\mu}}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) + \frac{\partial R}{\partial \theta}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) \frac{\partial \theta_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} + \frac{\partial R}{\partial \phi}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} \quad (2.7.12)$$

$$= R_0 \frac{\partial c}{\partial \alpha_{\lambda\mu}}(\alpha) F(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) + R_0 c(\alpha) \text{Re } Y_{\lambda\mu}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) + R_0 c(\alpha) G_{\lambda\mu}(\alpha), \quad (2.7.13)$$

avec

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_{\lambda\mu}}(\theta, \phi; \alpha) = \text{Re } Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi), \quad (2.7.14)$$

obtenu en dérivant l'équation (2.7.9) et en ayant posé par définition

$$G_{\lambda\mu}(\alpha) = \frac{\partial F}{\partial \theta}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) \frac{\partial \theta_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} + \frac{\partial F}{\partial \phi}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} \quad (2.7.15)$$

$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\rho=-\nu}^{\nu} \alpha_{\nu\rho} \left( \frac{\partial \operatorname{Re} Y_{\nu\rho}}{\partial \theta}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) \frac{\partial \theta_{\alpha}}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}} + \frac{\partial \operatorname{Re} Y_{\nu\rho}}{\partial \phi}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}} \right). \quad (2.7.16)$$

**LEMME 8 :**

L'expression des dérivées de la distance par rapport aux coordonnées de forme purement réelles est

$$\begin{aligned} \frac{\partial \operatorname{dist}_{\Sigma}}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}}(\vec{r}; \alpha) &= -\frac{\vec{r} - \vec{R}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}; \alpha)}{\operatorname{dist}_{\Sigma}(\vec{r}; \alpha)} \cdot \vec{n}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) R_0 \frac{\partial c}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}}(\alpha) F(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}; \alpha) \\ &\quad - \frac{\vec{r} - \vec{R}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}; \alpha)}{\operatorname{dist}_{\Sigma}(\vec{r}; \alpha)} \cdot \vec{n}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) R_0 c(\alpha) [\operatorname{Re} Y_{\lambda^{\mu}}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) + G_{\lambda^{\mu}}(\alpha)] \\ &\quad - \left[ \vec{r} \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) \frac{\partial \theta_{\alpha}}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}} + \vec{r} \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}} \right] \frac{R(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}; \alpha)}{\operatorname{dist}_{\Sigma}(\vec{r}; \alpha)}. \end{aligned} \quad (2.7.17)$$

Nous cherchons quel est le lien entre  $\frac{\partial \operatorname{dist}_{\Sigma}}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}}(\vec{r}'; \alpha)$  et  $\frac{\partial \operatorname{dist}_{\Sigma}}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}}(\vec{r}; \alpha)$  où  $\vec{r}'$  et  $\vec{r}$  représentent des positions de nucléons symétriques. En général la dérivée de la distance n'est pas invariante par symétrie. Plus exactement une partie de cette dérivée est invariante et l'autre non <sup>12</sup>.

**THÉORÈME 11 :**

Nous écrivons les dérivées de la distance par rapport aux coordonnées de forme

$$\frac{\partial \operatorname{dist}_{\Sigma}}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}}(\vec{r}; \alpha) = D_{\lambda^{\mu}}^{(1)}(\vec{r}; \alpha) + D_{\lambda^{\mu}}^{(2)}(\vec{r}; \alpha), \quad (2.7.18)$$

où le premier terme est invariant par les plans de symétrie de base

$$\begin{aligned} D_{\lambda^{\mu}}^{(1)}(\vec{r}; \alpha) &= -\frac{\vec{r} - \vec{R}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}; \alpha)}{\operatorname{dist}_{\Sigma}(\vec{r}; \alpha)} \cdot \vec{n}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) R_0 \left[ \frac{\partial c}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}}(\alpha) F(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}; \alpha) + c(\alpha) G_{\lambda^{\mu}}(\alpha) \right] \\ &\quad - \left[ \vec{r} \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) \frac{\partial \theta_{\alpha}}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}} + \vec{r} \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}} \right] R_0 c(\alpha) F(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}; \alpha), \end{aligned} \quad (2.7.19)$$

et le second terme n'est pas invariant par les plans de symétrie

$$D_{\lambda^{\mu}}^{(2)}(\vec{r}; \alpha) = -\frac{\vec{r} - \vec{R}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}; \alpha)}{\operatorname{dist}_{\Sigma}(\vec{r}; \alpha)} \cdot \vec{n}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) R_0 c(\alpha) \operatorname{Re} Y_{\lambda^{\mu}}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}). \quad (2.7.20)$$

— Si  $\vec{r}'$  est le symétrique de  $\vec{r}$  par rapport à  $(zOx)$  alors

$$\frac{\partial \operatorname{dist}_{\Sigma}}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}}(\vec{r}'; \alpha) = D_{\lambda^{\mu}}^{(1)}(\vec{r}; \alpha) + D_{\lambda^{\mu}}^{(2)}(\vec{r}; \alpha); \quad (2.7.21)$$

— Si  $\vec{r}'$  est le symétrique de  $\vec{r}$  par rapport à  $(xOy)$  alors

$$\frac{\partial \operatorname{dist}_{\Sigma}}{\partial \alpha_{\lambda^{\mu}}}(\vec{r}'; \alpha) = D_{\lambda^{\mu}}^{(1)}(\vec{r}; \alpha) + (-1)^{\lambda-\mu} D_{\lambda^{\mu}}^{(2)}(\vec{r}; \alpha); \quad (2.7.22)$$

---

12. Voir à l'annexe D<sub>2</sub> p. 85.

— Si  $\vec{r}'$  est le symétrique de  $\vec{r}$  par rapport à  $(yOz)$  alors

$$\frac{\partial \text{dist}_\Sigma}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}}(\vec{r}'; \alpha) = D_{\lambda^\mu}^{(1)}(\vec{r}; \alpha) + (-1)^\mu D_{\lambda^\mu}^{(2)}(\vec{r}; \alpha); \quad (2.7.23)$$

— Si  $\vec{r}'$  est le symétrique de  $\vec{r}$  par rapport à  $(zOx)$  et  $(xOy)$  alors

$$\frac{\partial \text{dist}_\Sigma}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}}(\vec{r}'; \alpha) = D_{\lambda^\mu}^{(1)}(\vec{r}; \alpha) + (-1)^{\lambda-\mu} D_{\lambda^\mu}^{(2)}(\vec{r}; \alpha); \quad (2.7.24)$$

— Si  $\vec{r}'$  est le symétrique de  $\vec{r}$  par rapport à  $(zOx)$  et  $(yOz)$  alors

$$\frac{\partial \text{dist}_\Sigma}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}}(\vec{r}'; \alpha) = D_{\lambda^\mu}^{(1)}(\vec{r}; \alpha) + (-1)^\mu D_{\lambda^\mu}^{(2)}(\vec{r}; \alpha); \quad (2.7.25)$$

— Si  $\vec{r}'$  est le symétrique de  $\vec{r}$  par rapport à  $(xOy)$  et  $(yOz)$  alors

$$\frac{\partial \text{dist}_\Sigma}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}}(\vec{r}'; \alpha) = D_{\lambda^\mu}^{(1)}(\vec{r}; \alpha) + (-1)^\lambda D_{\lambda^\mu}^{(2)}(\vec{r}; \alpha); \quad (2.7.26)$$

— Si  $\vec{r}'$  est le symétrique de  $\vec{r}$  par rapport à  $(xOy)$ ,  $(yOz)$  et  $(zOx)$  alors

$$\frac{\partial \text{dist}_\Sigma}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}}(\vec{r}'; \alpha) = D_{\lambda^\mu}^{(1)}(\vec{r}; \alpha) + (-1)^\lambda D_{\lambda^\mu}^{(2)}(\vec{r}; \alpha). \quad (2.7.27)$$

~~~~~

Ce résultat qui apparaît en contradiction avec le principe de symétrie mériterait d'être davantage analysé afin de montrer que la contradiction n'est qu'apparente. Mais ce n'est pas le lieu pour cela et nous revenons à un aspect moins calculatoire.

2.8 Vers de nouvelles symétries

SUITE AUX travaux de nombreux prédécesseurs en cristallographie et en mathématiques, Pierre CURIE proposa, en 1894, un nouveau principe de la physique.

PRINCIPE 1 : PRINCIPE DE SYMÉTRIE

Lorsque certaines causes produisent certains effets, les éléments de symétrie des causes doivent se retrouver dans les effets produits. Lorsque certains effets révèlent une certaine dissymétrie, cette dissymétrie doit se retrouver dans les causes qui lui ont donné naissance.

~~~~~

Les coordonnées de forme qui sont habituellement employées pour décrire la forme d'un noyau d'atome sont  $\alpha_2^0$ ,  $\alpha_2^{\pm 2}$ ,  $\alpha_3^0$ ,  $\alpha_4^0$ . Les coordonnées de forme  $\alpha_2^0$  et  $\alpha_4^0$  sont utilisées pour décrire une forme d'ellipsoïde axial. Toutes les figures données dans la suite ont été réalisées avec le logiciel *Surfer* développé au *Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach*.

Nous voyons tout d'abord sur les figures 2.1 p. 65 et 2.2 p. 65, deux noyaux dits *prolates* ou *cigares* ayant la forme d'une bactérie appelée *bacille*. L'augmentation forte de  $\alpha_2^0$  creuse la





Figure 2.1 – Forme d’un noyau cigare vu dans deux directions avec  $\alpha_2^0 = 0,4$



Figure 2.2 – Forme d’un noyau cigare vu dans deux directions avec  $\alpha_2^0 = 0,8$



Figure 2.3 – Forme d’un noyau cigare vu dans deux directions avec  $\alpha_2^0 = 0,8$  et  $\alpha_4^0 = 0,2$

partie centrale suivant un anneau. Ce creusement marque la préparation de la fission du noyau de manière symétrique. Mais il est possible en utilisant  $\alpha_4^0$  de combler ce creusement comme nous le voyons sur la figure 2.3. Nous avons même exagéré un peu la valeur de  $\alpha_4^0$  pour bien montrer son influence par l’apparition d’une bosse annulaire. Viennent les noyaux *oblates* ou *galettes* dont la valeur de  $\alpha_2^0$  est négative comme sur les figures 2.4 p. 66 et 2.5 p. 66. Lorsque la déformation n’est pas trop importante, cette forme nous rappelle celle de la Terre aplatie aux pôles. Lorsque la déformation est plus importante, la forme subit un pincement axial qui tend à la faire devenir torique à l’image d’une hématie. Les coordonnées de forme  $\alpha_2^0$  et  $\alpha_2^{\pm 2}$  sont utilisées pour décrire une forme d’ellipsoïde triaxial comme sur la figure 2.6 p. 66 et la coordonnée



Figure 2.4 – Forme d’un noyau oblate vu dans deux directions avec  $\alpha_2^0 = -0,4$



Figure 2.5 – Forme d’un noyau oblate vu dans deux directions avec  $\alpha_2^0 = -0,8$



Figure 2.6 – Forme d’un noyau triaxial avec  $\alpha_2^0 = 0,8$  et  $\alpha_2^{\pm 2} = 0,2$

Figure 2.7 – Forme d’un noyau en poire avec  $\alpha_3^0 = 0,4$

de forme  $\alpha_3^0$  est utilisée pour une forme de poire<sup>13</sup> comme sur la figure 2.7. Ces coordonnées de forme peuvent être utilisées ensemble pour donner des formes variées, dont celles qui conduisent à des transitions de forme pour les noyaux en rotation rapide comme les transitions de JACOBI ou de POINCARÉ étudiées dans [11], [12] et [13] (bibliographie p. 103), comme sur les figures 2.8 p. 67 et 2.9 p. 67. Les diverses associations de ces coordonnées de forme conduisent à des formes associées à différents groupes de symétries. Nous utilisons la notation d’Arthur SCHOENFLIES pour repérer ces groupes et nous avons résumé dans le tableau 2.1 p. 67 les groupes de symétries

<sup>13</sup>. Cela ne déplairait pas à Érik SATIE, compositeur des pièces pour piano « Trois morceaux en forme de poire ».

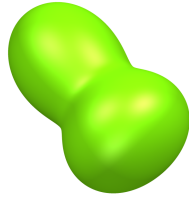


Figure 2.8 – Forme d’un noyau en poire allongée avec  $\alpha_2^0 = 0,8$  et  $\alpha_3^0 = 0,4$

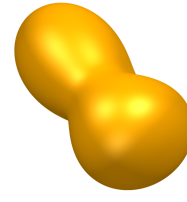


Figure 2.9 – Forme étrange avec  $\alpha_2^0 = 0,8$  et aussi  $\alpha_2^{\pm 2} = 0,2$  et encore  $\alpha_3^0 = 0,4$

correspondant aux coordonnées de formes utilisées habituellement en physique nucléaire. Pour retrouver le groupe de symétries associé à une des formes représentées dans les figures données ici, nous utilisons le diagramme de recherche explicité dans les figures E<sub>2.1</sub> p. 96 et E<sub>2.2</sub> p. 97 de l’annexe E<sub>2</sub>. Par exemple pour les noyaux prolates ou oblates des figures 2.1 p. 65, 2.2 p. 65, 2.4 p. 66 et 2.5 p. 66, la forme a un axe de révolution, a un centre d’inversion  $i$  ce qui donne le groupe  $D_{\infty h}$  ( $\infty$  signifiant que le groupe contient un axe de révolution,  $h$  signifiant que le groupe contient un plan de symétrie perpendiculaire à l’axe de révolution et  $D$  pour dièdre indiquant que le groupe contient un axe  $C_2$  perpendiculaire à l’axe de révolution). Autre exemple pour les noyaux en forme de poire sur la figure 2.7 p. 66, la forme a un axe de révolution, n’a pas de centre d’inversion ce qui donne le groupe  $C_{\infty v}$  ( $\infty$  signifiant que le groupe contient un axe de révolution,  $v$  signifiant que tout plan contenant l’axe de révolution est plan de symétrie et  $C$  pour cyclique indiquant que le groupe contient un axe de rotation, et ici de révolution). Dernier exemple pour le noyau triaxial sur la figure 2.6 p. 66, la forme n’a pas d’axe de révolution, a un axe d’ordre  $n = 2$  au maximum, n’a pas d’axe de rotation-réflexion d’ordre  $2n = 4$  ( $S_4$ ), a un autre axe  $C_2$  perpendiculaire au premier, a un plan perpendiculaire à l’axe d’ordre 2 ( $\sigma_h$ ) ce qui donne le groupe  $D_{2h}$ .

| Coordonnées de forme                           | Groupe de symétries |
|------------------------------------------------|---------------------|
| $\{\alpha_2^0\}$                               | $D_{\infty h}$      |
| $\{\alpha_2^0, \alpha_4^0\}$                   | $D_{\infty h}$      |
| $\{\alpha_3^0\}$                               | $C_{\infty v}$      |
| $\{\alpha_2^0, \alpha_3^0\}$                   | $C_{\infty v}$      |
| $\{\alpha_2^0, \alpha_2^{\pm 2}\}$             | $D_{2h}$            |
| $\{\alpha_2^0, \alpha_2^{\pm 2}, \alpha_3^0\}$ | $C_{2v}$            |

Tableau 2.1 – Coordonnées de forme et groupes de symétries

Le choix d’un groupe de symétries a des conséquences sur la forme. Comme il dépend d’elle, le champ moyen est invariant par l’action des opérations de symétrie de ce groupe. Mais dans notre cas, le système est un nucléon, et le fait qu’un nucléon est un fermion nous oblige à

considérer le groupe double associé au groupe de symétries choisi. En l'occurrence, nous avons à considérer  $D_{\infty h}^D$ ,  $C_{\infty v}^D$ ,  $D_{2h}^D$ ,  $C_{2v}^D$ . Dans les groupes doubles apparaissent de nouvelles opérations de symétrie dont en particulier l'opération  $R$  de rotation d'un angle  $2\pi$  rad autour de n'importe quel axe, opération qui ne coïncide plus avec l'identité. L'identité est devenue la rotation d'un angle  $4\pi$  rad autour de n'importe quel axe. Les autres nouvelles opérations sont issues de la composition de  $R$  avec les opérations déjà présentes dans le groupe simple. Mais il apparaît aussi de nouvelles représentations irréductibles, que nous appelons *représentations dédoublées* (en anglais *double-valued representations*). Ce sont ces représentations dédoublées qui sont les représentations irréductibles pour les fermions.

**THÉORÈME 12 :**

Pour chaque valeur propre d'un hamiltonien, les états propres constituent une base de représentations irréductibles du groupe de symétries du système. Soit  $\hat{O}$  un opérateur de symétrie du groupe de symétries du système, si  $|\psi_\nu\rangle$  est un état propre de valeur propre  $e_\nu$  alors  $\hat{O}|\psi_\nu\rangle$  est aussi un état propre avec la même valeur propre  $e_\nu$ . Autrement dit<sup>14</sup>

$$[\hat{H}, \hat{O}] = 0 \quad \text{ou} \quad \hat{H} = \hat{O}\hat{H}\hat{O}^{-1}. \quad (2.8.3)$$

**COROLLAIRE 2 :**

Le degré de dégénérescence de l'état est égal à la dimension de la représentation, c'est-à-dire au caractère de l'opération identité.

À partir des tables de caractères données à l'annexe E<sub>2</sub> p. 91, nous constatons que les groupes  $C_{\infty v}^D$ ,  $D_{\infty h}^D$ ,  $D_{2h}^D$  et  $C_{2v}^D$  offrent au maximum des dégénérescences doubles qui correspondent en fait à la dégénérescence de KRAMERS vis-à-vis du renversement du temps.

**SCOLIE 4 : L'INTÉRÊT POUR LES SYMÉTRIES DE HAUT RANG**

Le principe de symétrie ne permet pas de prévoir les symétries qui vont être choisies, il ne fait que mettre en place une causalité liée aux symétries. En effet, ce principe signifie que l'introduction d'une certaine dissymétrie produit des propriétés nouvelles. Cependant, trop de dissymétries vont brouiller les propriétés nouvelles. C'est de cette manière que Pierre et Jacques CURIE découvrirent la piézoélectricité du quartz, propriété qui ne peut apparaître que si le cristal n'est pas centrosymétrique. Les groupes de symétries envisagés habituellement en physique nucléaire sont assez pauvres en opérations de symétrie, en particulier les groupes  $D_{2h}$  et  $C_{2v}$  avec respectivement huit et quatre opérations. Entre ces groupes et le groupe de la sphère  $K_h$ , le principe de symétrie nous suggère de chercher les groupes de symétries de haut rang. Il s'agit des groupes de symétries du tétraèdre  $T_d$ , de l'octaèdre  $O_h$  et de l'icosaèdre  $I_h$  qui pourraient être prometteurs. Ils ont respectivement vingt-quatre, quarante-huit et soixante opérations de symétrie. Mais en outre, l'analyse des tables de caractères données à l'annexe E<sub>2</sub> p. 91, nous indique que ces groupes de haut rang présentent un autre intérêt lié à l'application de la théorie

14.

$$\hat{H}|\psi_\nu\rangle = e_\nu|\psi_\nu\rangle \quad (2.8.1)$$

et

$$\hat{H}\hat{O}|\psi_\nu\rangle = e_\nu\hat{O}|\psi_\nu\rangle = \hat{O}e_\nu|\psi_\nu\rangle = \hat{O}\hat{H}|\psi_\nu\rangle. \quad (2.8.2)$$

des groupes à la mécanique quantique, et en particulier au corollaire 2 p. 68. Faisons le bilan dans le tableau 2.2 des dégénérescences offertes par ces groupes de haut rang. Nous comptabilisons le nombre de représentations pour chaque niveau de dégénérescence et pour chaque groupe. Les groupes de symétries habituels n'offrent que la dégénérescence double de KRAMERS. Les

| Dégénérescence | $T_d^D$ | $O_h^D$ | $I_h^D$ |
|----------------|---------|---------|---------|
| 2              | 2       | 4       | 4       |
| 4              | 1       | 2       | 2       |
| 6              | 0       | 0       | 2       |

Tableau 2.2 – Nombres de représentations dédoublées

trois groupes de haut rang  $T_d^D$ ,  $O_h^D$  et  $I_h^D$  apportent quant à eux des dégénérescences doubles et quadruples et même sextuples pour le groupe de l'icosaèdre. L'existence de tels degrés de dégénérescence peut conduire à des écarts énergétiques importants entre les niveaux d'énergie, accroissant ainsi la stabilité de certains noyaux pour des nombres magiques de nucléons : 16, 20, 32, 40, 56, 70 pour le tétraèdre et l'octaèdre ; 8, 46, 60 pour l'icosaèdre ; 2, 8, 20, 50, 82 pour la sphère. Il faut donc préciser quelles sont les contraintes sur les coordonnées de forme conduisant à chacun de ces groupes. Les formes de noyau associées à ces groupes de symétries sont représentées sur les figures suivantes.

Tout d'abord la forme tétraédrique donnée à la figure 2.10 qui utilise une déformation octupolaire

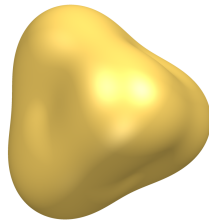


Figure 2.10 – Forme de noyau tétraédrique avec  $\alpha_3^{\pm 2} = 0,2$

non axiale.

Ensuite les déformations octaédrique, figure 2.11 p. 70, et cubique, figure 2.12 p. 70, qui correspondent au même groupe de symétries mais qui sont obtenues pour des déformations opposées, ce qui traduit la conjugaison de ces deux formes. Ce sont des déformations hexadécapolaires non axiales. Nous pouvons montrer, pour comparer, ce que donne la déformation hexadécapolaire axiale pure avec les figures 2.13, et 2.14 p. 70 et nous voyons qu'elles présentent une symétrie de révolution absente dans le cas de l'octaèdre et du cube.

Enfin les formes icosaédrique, figure 2.15 p. 70, et dodécaédrique, figure 2.16 p. 70, également conjuguées. Ce sont des déformations tétrahexacontapolaires non axiales. À titre de comparaison, les formes tétrahexacontapolaires axiales, figures 2.17 et 2.18 p. 70, présentent une symétrie de révolution.

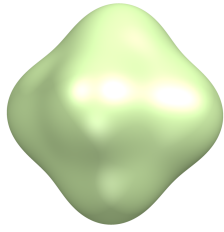


Figure 2.11 – Forme de noyau octaédrique avec  $\alpha_4^0 = 0,2$  et  $\alpha_4^{\pm 4} = 0,12$

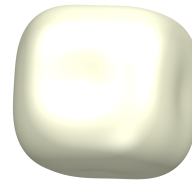


Figure 2.12 – Forme de noyau cubique avec  $\alpha_4^0 = -0,2$  et  $\alpha_4^{\pm 4} = -0,12$

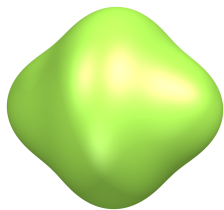


Figure 2.13 – Forme de noyau hexadécapolaire avec  $\alpha_4^0 = 0,2$

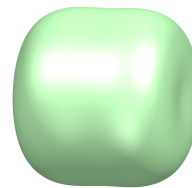


Figure 2.14 – Forme de noyau hexadécapolaire avec  $\alpha_4^0 = -0,2$

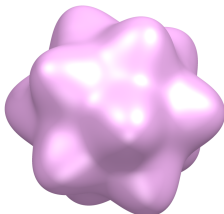


Figure 2.15 – Forme de noyau icosaédrique avec  $\alpha_6^0 = 0,2$  et  $\alpha_6^{\pm 5} = \mp 0,16$

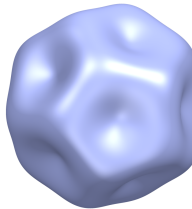


Figure 2.16 – Forme de noyau dodécaédrique avec  $\alpha_6^0 = -0,2$  et  $\alpha_6^{\pm 5} = \pm 0,16$

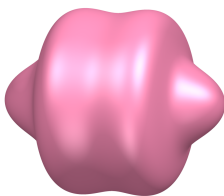


Figure 2.17 – Forme de noyau tétrahexapolaire  $\alpha_6^0 = 0,2$

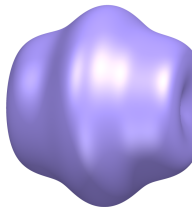


Figure 2.18 – Forme de noyau tétrahexapolaire  $\alpha_6^0 = -0,2$

La manière de trouver les contraintes sur les coordonnées de forme a été exposée dans la section 2.6 p. 57 mais la détermination est assez calculatoire. Elles ont déjà été partiellement réalisées pour les groupes de haut rang. Pour les groupes  $T_d^D$  et  $O_h^D$ , il faut voir [14] (bibliographie p. 103) et pour le groupe icosaédrique nous proposons nous-même les relations détaillées dans l'annexe F<sub>2</sub> p. 99. Nous résumons le tout dans le tableau 2.3 pour des coordonnées de forme réelles. Toutefois les conséquences de l'usage de ces groupes de symétries de haut rang ne sont

| Groupe de symétries | Coordonnées de forme                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|---------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $T_d^D$             | $\left\{ \alpha_3^{\pm 2}, \alpha_7^{\pm 2}, \alpha_7^{\pm 6} = -\sqrt{\frac{11}{13}}\alpha_7^{\pm 2}, \alpha_9^{\pm 2}, \alpha_9^{\pm 6} = \sqrt{\frac{13}{3}}\alpha_9^{\pm 2}, \dots \right\}$                                                                                                                                                                                                           |
| $O_h^D$             | $\left\{ \alpha_4^0, \alpha_4^{\pm 4} = \sqrt{\frac{5}{14}}\alpha_4^0, \alpha_6^0, \alpha_6^{\pm 4} = \sqrt{\frac{7}{2}}\alpha_6^0, \right.$<br>$\left. \alpha_8^0, \alpha_8^{\pm 4} = \sqrt{\frac{28}{198}}\alpha_8^0, \alpha_8^{\pm 8} = \sqrt{\frac{65}{128}}\alpha_8^0, \dots \right\}$                                                                                                                |
| $I_h^D$             | $\left\{ \alpha_6^0, \alpha_6^{\pm 5} = \mp \sqrt{\frac{7}{11}}\alpha_6^0, \alpha_{10}^0, \alpha_{10}^{\pm 5} = \pm \sqrt{\frac{33}{13}}\alpha_{10}^0, \alpha_{10}^{\pm 10} = \sqrt{\frac{187}{247}}\alpha_{10}^0 \right.$<br>$\left. \alpha_{12}^0, \alpha_{12}^{\pm 5} = \mp \frac{1}{3}\sqrt{\frac{286}{119}}\alpha_{12}^0, \alpha_{12}^{\pm 10} = \sqrt{\frac{247}{357}}\alpha_{12}^0, \dots \right\}$ |

Tableau 2.3 – Liaisons des coordonnées de forme pour les groupes de haut rang

pas épuisées. En effet, le tenseur de masse est aussi affecté et donc naturellement le mouvement collectif. Ce qui finalement ne doit pas tellement nous étonner. La conséquence de l'existence de contraintes entre les coordonnées de forme a déjà été évoquée dans la section 1.2 p. 18 avec la relation

$$(1.2.29) \quad \alpha_\lambda^{-\mu} = (-1)^\mu \alpha_\lambda^\mu,$$

et consiste en l'apparition de coefficients, p. 19,

$$(1.2.37) \quad \mathcal{D}_{\lambda'\mu}^{\lambda\mu'} = \delta_{\lambda'}^\lambda \delta_\mu^{\mu'} (2 - \delta_{\mu 0})$$

dans le tenseur de masse. Il faut tenir compte des nouvelles contraintes qui s'ajoutent pour modifier les coefficients  $\mathcal{D}_{\lambda'\mu}^{\lambda\mu'}$  selon le contexte. Pour cela nous repartons de l'expression

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \dot{\alpha}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu}$$

et du fait que les relations des contraintes sont systématiquement des proportionnalités, les termes liés s'additionnent simplement. Pour les premiers ordres du tétraèdre

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \dot{\alpha}_\lambda^\mu \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda^\mu} &\rightarrow \dot{\alpha}_3^2 \frac{\partial}{\partial \alpha_3^2} + \dot{\alpha}_3^{-2} \frac{\partial}{\partial \alpha_3^{-2}} \\ &+ \dot{\alpha}_7^2 \frac{\partial}{\partial \alpha_7^2} + \dot{\alpha}_7^{-2} \frac{\partial}{\partial \alpha_7^{-2}} + \dot{\alpha}_7^6 \frac{\partial}{\partial \alpha_7^6} + \dot{\alpha}_7^{-6} \frac{\partial}{\partial \alpha_7^{-6}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \dot{\alpha}_9^2 \frac{\partial}{\partial \alpha_9^2} + \dot{\alpha}_9^{-2} \frac{\partial}{\partial \alpha_9^{-2}} + \dot{\alpha}_9^6 \frac{\partial}{\partial \alpha_9^6} + \dot{\alpha}_9^{-6} \frac{\partial}{\partial \alpha_9^{-6}} \\
& = 2\dot{\alpha}_3^2 \frac{\partial}{\partial \alpha_3^2} + 4\dot{\alpha}_7^2 \frac{\partial}{\partial \alpha_7^2} + 4\dot{\alpha}_9^2 \frac{\partial}{\partial \alpha_9^2}, \quad (2.8.4)
\end{aligned}$$

pour les premiers ordres de l'octaèdre

$$\begin{aligned}
\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \dot{\alpha}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \alpha_{\lambda}^{\mu}} & \rightarrow \dot{\alpha}_4^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_4^0} + \dot{\alpha}_4^4 \frac{\partial}{\partial \alpha_4^4} + \dot{\alpha}_4^{-4} \frac{\partial}{\partial \alpha_4^{-4}} \\
& + \dot{\alpha}_6^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_6^0} + \dot{\alpha}_6^4 \frac{\partial}{\partial \alpha_6^4} + \dot{\alpha}_6^{-4} \frac{\partial}{\partial \alpha_6^{-4}} \\
& + \dot{\alpha}_8^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_8^0} + \dot{\alpha}_8^4 \frac{\partial}{\partial \alpha_8^4} + \dot{\alpha}_8^{-4} \frac{\partial}{\partial \alpha_8^{-4}} + \dot{\alpha}_8^8 \frac{\partial}{\partial \alpha_8^8} + \dot{\alpha}_8^{-8} \frac{\partial}{\partial \alpha_8^{-8}} \\
& = 3\dot{\alpha}_4^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_4^0} + 3\dot{\alpha}_6^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_6^0} + 5\dot{\alpha}_8^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_8^0} \quad (2.8.5)
\end{aligned}$$

et pour les premiers ordres de l'icosaèdre

$$\begin{aligned}
\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \dot{\alpha}_{\lambda}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \alpha_{\lambda}^{\mu}} & \rightarrow \dot{\alpha}_6^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_6^0} + \dot{\alpha}_6^5 \frac{\partial}{\partial \alpha_6^5} + \dot{\alpha}_6^{-5} \frac{\partial}{\partial \alpha_6^{-5}} \\
& + \dot{\alpha}_{10}^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_{10}^0} + \dot{\alpha}_{10}^5 \frac{\partial}{\partial \alpha_{10}^5} + \dot{\alpha}_{10}^{-5} \frac{\partial}{\partial \alpha_{10}^{-5}} + \dot{\alpha}_{10}^{10} \frac{\partial}{\partial \alpha_{10}^{10}} + \dot{\alpha}_{10}^{-10} \frac{\partial}{\partial \alpha_{10}^{-10}} \\
& + \dot{\alpha}_{12}^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_{12}^0} + \dot{\alpha}_{12}^5 \frac{\partial}{\partial \alpha_{12}^5} + \dot{\alpha}_{12}^{-5} \frac{\partial}{\partial \alpha_{12}^{-5}} + \dot{\alpha}_{12}^{10} \frac{\partial}{\partial \alpha_{12}^{10}} + \dot{\alpha}_{12}^{-10} \frac{\partial}{\partial \alpha_{12}^{-10}} \\
& = 3\dot{\alpha}_6^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_6^0} + 5\dot{\alpha}_{10}^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_{10}^0} + 5\dot{\alpha}_{12}^0 \frac{\partial}{\partial \alpha_{12}^0}. \quad (2.8.6)
\end{aligned}$$

Ainsi nous ajoutons des facteurs correctifs liés à la possibilité d'une des trois symétries de haut rang

$$\mathcal{D}_{\lambda'\mu}^{\lambda\mu'} = \delta_{\lambda'}^{\lambda} \delta_{\mu}^{\mu'} (2 - \delta_{\mu 0}) \mathcal{I}_{\mu}^{\lambda} \mathcal{O}_{\mu}^{\lambda} \mathcal{I}_{\mu}^{\lambda} \quad (2.8.7)$$

où

$$\mathcal{I}_{\mu}^{\lambda} = 1 \quad \text{sauf} \quad \mathcal{I}_2^7 = 2, \mathcal{I}_6^7 = 0, \mathcal{I}_2^9 = 2, \mathcal{I}_6^9 = 0, \dots \quad (2.8.8)$$

$$\mathcal{O}_{\mu}^{\lambda} = 1 \quad \text{sauf} \quad \mathcal{O}_0^4 = 3, \mathcal{O}_4^4 = 0, \mathcal{O}_0^6 = 3, \mathcal{O}_4^6 = 0, \mathcal{O}_0^8 = 5, \mathcal{O}_4^8 = 0, \mathcal{O}_8^8 = 0, \dots \quad (2.8.9)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_{\mu}^{\lambda} = 1 \quad \text{sauf} \quad \mathcal{I}_0^6 = 3, \mathcal{I}_5^6 = 0, \mathcal{I}_0^{10} = 5, \mathcal{I}_5^{10} = 0, \mathcal{I}_{10}^{10} = 0, \\
\mathcal{I}_0^{12} = 5, \mathcal{I}_5^{12} = 0, \mathcal{I}_{10}^{12} = 0, \dots \quad (2.8.10)
\end{aligned}$$

Nous savons maintenant comment contrôler la symétrie géométrique pour le noyau de l'atome. Mais nous n'avons pour l'instant qu'une vision très statique de cette symétrie. Le fait que les coordonnées de forme puissent évoluer confère à la symétrie et au noyau une dynamique dont nous avons déjà posé les bases dans le cadre de l'approximation adiabatique. Il faut maintenant voir comment la symétrie et le champ moyen s'expriment concrètement dans l'inertie collective en déterminant aussi précisément que possible le tenseur de masse qui en résulte.



## Annexes du chapitre 2



## Annexe A<sub>2</sub>

# Énergie d'un état dans le cadre du champ moyen

Nous allons d'abord voir l'action d'un opérateur d'annihilation sur l'état fondamental, p. 53,

$$(2.2.12) \quad |\Psi_0\rangle = \prod_{n=1}^N \hat{c}_n^+ |\emptyset\rangle$$

et nous définissons

$$|\Psi_{0/\nu}\rangle = \prod_{\substack{n=1 \\ n \neq \nu}}^N \hat{c}_n^+ |\emptyset\rangle. \quad (\text{A}_2.1)$$

Nous rappelons les règles de commutation

$$\{\hat{c}_\nu, \hat{c}_\mu\} = \hat{0}, \quad \{\hat{c}_\nu^+, \hat{c}_\mu^+\} = \hat{0} \quad \text{et} \quad \{\hat{c}_\nu^+, \hat{c}_\mu\} = \delta_{\nu\mu} \hat{1}. \quad (\text{A}_2.2)$$

Alors si  $\nu \leq N$

$$\hat{c}_\nu |\Psi_0\rangle = \hat{c}_\nu \prod_{n=1}^N \hat{c}_n^+ |\emptyset\rangle \quad (\text{A}_2.3)$$

$$= \hat{c}_\nu \prod_{n=1}^{\nu-1} \hat{c}_n^+ \hat{c}_\nu^+ \prod_{n=\nu+1}^N \hat{c}_n^+ |\emptyset\rangle \quad (\text{A}_2.4)$$

$$= (-1)^{\nu-1} \prod_{n=1}^{\nu-1} \hat{c}_n^+ \hat{c}_\nu \hat{c}_\nu^+ \prod_{n=\nu+1}^N \hat{c}_n^+ |\emptyset\rangle \quad (\text{A}_2.5)$$

$$= (-1)^{\nu-1} \prod_{n=1}^{\nu-1} \hat{c}_n^+ \prod_{n=\nu+1}^N \hat{c}_n^+ |\emptyset\rangle - (-1)^{\nu-1} \prod_{n=1}^{\nu-1} \hat{c}_n^+ \hat{c}_\nu^+ \hat{c}_\nu \prod_{n=\nu+1}^N \hat{c}_n^+ |\emptyset\rangle \quad (\text{A}_2.6)$$

$$= (-1)^{\nu-1} |\Psi_{0/\nu}\rangle - (-1)^{\nu-1} (-1)^{N-\nu} \prod_{n=1}^{\nu-1} \hat{c}_n^+ \hat{c}_\nu^+ \prod_{n=\nu+1}^N \hat{c}_n^+ \hat{c}_\nu |\emptyset\rangle \quad (\text{A}_2.7)$$

$$= (-1)^{\nu-1} |\Psi_{0/\nu}\rangle + (-1)^N \prod_{n=1}^N \hat{c}_n^+ \hat{c}_\nu |\emptyset\rangle \quad (\text{A2.8})$$

$$= (-1)^{\nu-1} |\Psi_{0/\nu}\rangle, \quad (\text{A2.9})$$

et si  $\nu > N$

$$\hat{c}_\nu |\Psi_0\rangle = \hat{c}_\nu \prod_{n=1}^N \hat{c}_n^+ |\emptyset\rangle \quad (\text{A2.10})$$

$$= (-1)^N \prod_{n=1}^N \hat{c}_n^+ \hat{c}_\nu |\emptyset\rangle \quad (\text{A2.11})$$

$$= 0 \quad (\text{A2.12})$$

et aussi

$$\hat{c}_\nu^+ |\Psi_{0/\nu}\rangle = \hat{c}_\nu^+ \prod_{\substack{n=1 \\ n \neq \nu}}^N \hat{c}_n^+ |\emptyset\rangle \quad (\text{A2.13})$$

$$= \hat{c}_\nu^+ \prod_{n=1}^{\nu-1} \hat{c}_n^+ \prod_{n=\nu+1}^N \hat{c}_n^+ |\emptyset\rangle \quad (\text{A2.14})$$

$$= (-1)^{\nu-1} \prod_{n=1}^{\nu-1} \hat{c}_n^+ \hat{c}_\nu^+ \prod_{n=\nu+1}^N \hat{c}_n^+ |\emptyset\rangle \quad (\text{A2.15})$$

$$= (-1)^{\nu-1} |\Psi_0\rangle. \quad (\text{A2.16})$$

Le calcul de l'énergie de l'état fondamental, p. 53,

$$(2.2.14) \quad \mathcal{E}_0 = \langle \Psi_0 | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_0 \rangle = \sum_{\mu}^{\mathbf{N}^*} e_{\mu} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\mu} | \Psi_0 \rangle$$

est maintenant rapidement effectué

$$\mathcal{E}_0 = \sum_{\mu=1}^N e_{\mu} (-1)^{\mu-1} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\mu}^+ | \Psi_{0/\mu} \rangle \quad (\text{A2.17})$$

$$= \sum_{\mu=1}^N e_{\mu} (-1)^{\mu-1} (-1)^{\mu-1} \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle, \quad (\text{A2.18})$$

d'où le premier résultat du théorème 7 p. 53

$$(2.2.16) \quad \mathcal{E}_0 = \sum_{\mu=1}^N e_{\mu}.$$

Le calcul de l'énergie d'un état à une particule et un trou est un peu plus long mais sans grande difficulté ; nous considérons qu'une particule est passée de l'état  $|\psi_\iota\rangle$ ,  $\iota \leq N$ , à l'état  $|\psi_\kappa\rangle$ ,  $\kappa > N$ , p. 53,

$$(2.2.15) \quad \mathcal{E}_{\iota \rightarrow \kappa} = \langle \Psi_{\iota \rightarrow \kappa} | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_{\iota \rightarrow \kappa} \rangle = \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_{\mu} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\kappa} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\mu} \hat{c}_{\kappa}^+ \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle,$$

puis

$$\mathcal{E}_{\iota \rightarrow \kappa} = \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_{\mu} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\kappa} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle \delta_{\nu\kappa} - \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_{\mu} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\kappa} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\kappa}^+ \hat{c}_{\mu} \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle \quad (\text{A}_2.19)$$

$$\begin{aligned} &= e_{\kappa} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\kappa} \hat{c}_{\kappa}^+ \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle - \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_{\mu} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\kappa}^+ \hat{c}_{\mu} \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle \delta_{\mu\kappa} \\ &\quad + \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_{\mu} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\kappa} \hat{c}_{\mu} \hat{c}_{\kappa}^+ \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (\text{A}_2.20)$$

$$\begin{aligned} &= e_{\kappa} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle - e_{\kappa} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\kappa}^+ \hat{c}_{\kappa} \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle - e_{\kappa} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\kappa}^+ \hat{c}_{\kappa} \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle \\ &\quad + \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_{\mu} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\mu} \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle - \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_{\mu} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\kappa}^+ \hat{c}_{\kappa} \hat{c}_{\mu} \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (\text{A}_2.21)$$

$$\begin{aligned} &= e_{\kappa} (-1)^{\iota-1} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ | \Psi_{0/\iota} \rangle + 2e_{\kappa} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\kappa}^+ \hat{c}_{\iota} \hat{c}_{\kappa} | \Psi_0 \rangle \\ &\quad - \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_{\mu} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\iota} \hat{c}_{\mu} | \Psi_0 \rangle - \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_{\mu} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\kappa}^+ \hat{c}_{\mu} \hat{c}_{\iota} \hat{c}_{\kappa} | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (\text{A}_2.22)$$

$$= e_{\kappa} (-1)^{\iota-1} (-1)^{\iota-1} \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle + 0 - \sum_{\mu=1}^N e_{\mu} (-1)^{\mu-1} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\iota} | \Psi_{0/\mu} \rangle - 0 \quad (\text{A}_2.23)$$

$$= e_{\kappa} - \sum_{\mu=1}^N e_{\mu} (-1)^{\mu-1} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ | \Psi_{0/\mu} \rangle \delta_{\mu\iota} + \sum_{\mu=1}^N e_{\mu} (-1)^{\mu-1} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\iota} \hat{c}_{\mu}^+ | \Psi_{0/\mu} \rangle \quad (\text{A}_2.24)$$

$$= e_{\kappa} - e_{\iota} (-1)^{\iota-1} (-1)^{\iota-1} + \sum_{\mu=1}^N e_{\mu} (-1)^{\mu-1} (-1)^{\mu-1} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle \quad (\text{A}_2.25)$$

$$= e_{\kappa} - e_{\iota} + \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\iota}^+ \hat{c}_{\iota} | \Psi_0 \rangle \sum_{\mu=1}^N e_{\mu}; \quad (\text{A}_2.26)$$

et finalement nous obtenons le deuxième résultat du théorème 7 p. 53

$$(2.2.17) \quad \mathcal{E}_{\iota \rightarrow \kappa} = e_{\kappa} - e_{\iota} + \mathcal{E}_0.$$



## Annexe B<sub>2</sub>

### Symétries et coordonnées de forme

#### Effet de la symétrie du plan ( $xOy$ )

Considérons la symétrie par rapport au plan ( $xOy$ ). Alors

$$\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k} \quad \text{et} \quad \vec{r}' = x\vec{i} + y\vec{j} - z\vec{k} \quad (\text{B}_2.1)$$

et les angles sont liés par

$$\theta' = \pi - \theta \quad \text{et} \quad \phi' = \phi. \quad (\text{B}_2.2)$$

À partir des relations entre les angles, nous pouvons écrire

$$Y_{\lambda\mu}(\theta', \phi') = Y_{\lambda\mu}(\pi - \theta, \phi) \quad (\text{B}_2.3)$$

$$= Z_{\lambda\mu} P_{\lambda\mu}(-\cos\theta) e^{i\mu\phi} \quad (\text{B}_2.4)$$

$$= (-1)^{\lambda-\mu} Z_{\lambda\mu} P_{\lambda\mu}(\cos\theta) e^{i\mu\phi}, \quad (\text{B}_2.5)$$

et par conséquent

$$Y_{\lambda\mu}(\theta', \phi') = (-1)^{\lambda-\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi). \quad (\text{B}_2.6)$$

Cela permet d'écrire que

$$\text{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda}^{\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) (1 - (-1)^{\lambda-\mu}) = 0, \quad (\text{B}_2.7)$$

qui devient

$$\text{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\substack{\mu=-\lambda \\ \lambda-\mu \text{ impair}}}^{\lambda} \alpha_{\lambda}^{\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = 0, \quad (\text{B}_2.8)$$

ou encore

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\substack{\mu=-\lambda \\ \lambda-\mu \text{ impair}}}^{\lambda} (\text{Re} \alpha_{\lambda}^{\mu} \text{Re} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) - \text{Im} \alpha_{\lambda}^{\mu} \text{Im} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)) = 0, \quad (\text{B}_2.9)$$

égalité qui doit être vraie quels que soient  $\theta$  et  $\phi$ . Par conséquent, comme annoncé dans le théorème 8 p. 59, si le plan  $(xOy)$  est un plan de symétrie de la forme du noyau, alors les coordonnées de forme doivent vérifier que

$$(2.6.5) \quad \alpha_\lambda^\mu = 0 \text{ si } \lambda - \mu \text{ impair}$$

et

$$F(\theta, \phi; \alpha) = 1 + \operatorname{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\substack{\mu=-\lambda \\ \lambda-\mu \text{ pair}}}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi). \quad (\text{B}_2.10)$$

## Effet de la symétrie du plan $(yOz)$

Considérons la symétrie par rapport au plan  $(yOz)$ . Alors

$$\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k} \quad \text{et} \quad \vec{r}' = -x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k} \quad (\text{B}_2.11)$$

et les angles sont liés par

$$\theta' = \theta \quad \text{et} \quad \begin{cases} \phi' = \pi - \phi \text{ si } y \geq 0 \\ \phi' = 3\pi - \phi \text{ si } y \leq 0 \end{cases} \quad \text{ou en abrégé } \phi' = \left\{ \frac{\pi}{3\pi} \right\} - \phi. \quad (\text{B}_2.12)$$

À partir des relations entre les angles, nous pouvons écrire

$$Y_{\lambda\mu}(\theta', \phi') = Y_{\lambda\mu}(\theta, \left\{ \frac{\pi}{3\pi} \right\} - \phi) \quad (\text{B}_2.13)$$

$$= Z_{\lambda\mu} P_{\lambda\mu}(\cos \theta) e^{i\frac{\pi}{3\pi}\mu} e^{-i\mu\phi} \quad (\text{B}_2.14)$$

$$= (-1)^\mu (Z_{\lambda\mu} P_{\lambda\mu}(\cos \theta) e^{i\mu\phi})^*, \quad (\text{B}_2.15)$$

et par conséquent

$$Y_{\lambda\mu}(\theta', \phi') = (-1)^\mu Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi). \quad (\text{B}_2.16)$$

Cela permet d'écrire que

$$\operatorname{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu (Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) - (-1)^\mu Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi)) = 0, \quad (\text{B}_2.17)$$

qui devient

$$\operatorname{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu \left( \operatorname{Re} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) (1 - (-1)^\mu) + i \operatorname{Im} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) (1 + (-1)^\mu) \right) = 0 \quad (\text{B}_2.18)$$

$$\operatorname{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\substack{\mu=-\lambda \\ \mu \text{ impair}}}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu \operatorname{Re} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) + \operatorname{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\substack{\mu=-\lambda \\ \mu \text{ pair}}}^{\lambda} i \alpha_\lambda^\mu \operatorname{Im} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = 0 \quad (\text{B}_2.19)$$

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\substack{\mu=-\lambda \\ \mu \text{ impair}}}^{\lambda} \operatorname{Re} \alpha_\lambda^\mu \operatorname{Re} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) - \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\substack{\mu=-\lambda \\ \mu \text{ pair}}}^{\lambda} \operatorname{Im} \alpha_\lambda^\mu \operatorname{Im} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = 0, \quad (\text{B}_2.20)$$



égalité qui doit être vraie quels que soient  $\theta$  et  $\phi$ . Par conséquent, comme annoncé dans le théorème 8 p. 59, si le plan  $(yOz)$  est un plan de symétrie de la forme du noyau, alors les coordonnées de forme doivent vérifier que

$$(2.6.6) \quad \operatorname{Re} \alpha_\lambda^\mu = 0 \text{ si } \mu \text{ impair} \quad \text{et} \quad \operatorname{Im} \alpha_\lambda^\mu = 0 \text{ si } \mu \text{ pair}$$

et

$$F(\theta, \phi; \alpha) = 1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\substack{\mu=-\lambda \\ \mu \text{ pair}}}^{\lambda} \operatorname{Re} \alpha_\lambda^\mu \operatorname{Re} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) - \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\substack{\mu=-\lambda \\ \mu \text{ impair}}}^{\lambda} \operatorname{Im} \alpha_\lambda^\mu \operatorname{Im} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi). \quad (\text{B}_2.21)$$

## Effet de la symétrie du plan $(zOx)$

Considérons la symétrie par rapport au plan  $(zOx)$ . Alors

$$\vec{r} = x \vec{i} + y \vec{j} + z \vec{k} \quad \text{et} \quad \vec{r}' = x \vec{i} - y \vec{j} + z \vec{k} \quad (\text{B}_2.22)$$

et les angles sont liés par

$$\theta' = \theta \quad \text{et} \quad \phi' = 2\pi - \phi. \quad (\text{B}_2.23)$$

À partir des relations entre les angles, nous pouvons écrire

$$Y_{\lambda\mu}(\theta', \phi') = Y_{\lambda\mu}(\theta, 2\pi - \phi) \quad (\text{B}_2.24)$$

$$= Z_{\lambda\mu} P_{\lambda\mu}(\cos \theta) e^{i2\pi\mu} e^{-i\mu\phi} \quad (\text{B}_2.25)$$

$$= (Z_{\lambda\mu} P_{\lambda\mu}(\cos \theta) e^{i\mu\phi})^*, \quad (\text{B}_2.26)$$

et par conséquent

$$Y_{\lambda\mu}(\theta', \phi') = Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi). \quad (\text{B}_2.27)$$

Cela permet d'écrire que

$$\operatorname{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu (Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) - Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi)) = 0, \quad (\text{B}_2.28)$$

ou encore

$$\operatorname{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} i \alpha_\lambda^\mu \operatorname{Im} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = 0; \quad (\text{B}_2.29)$$

et finalement

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \operatorname{Im} \alpha_\lambda^\mu \operatorname{Im} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = 0, \quad (\text{B}_2.30)$$

égalité qui doit être vraie quels que soient  $\theta$  et  $\phi$ . Par conséquent, comme annoncé dans le théorème 8 p. 59, si le plan  $(zOx)$  est un plan de symétrie de la forme du noyau, alors les coordonnées de forme doivent vérifier que

$$(2.6.7) \quad \operatorname{Im} \alpha_\lambda^\mu = 0 \quad \text{ou simplement} \quad \alpha_\lambda^\mu \in \mathbb{R}$$

et

$$F(\theta, \phi; \alpha) = 1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \operatorname{Re} \alpha_\lambda^\mu \operatorname{Re} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi). \quad (\text{B}_2.31)$$

## Effet de la symétrie centrale

Considérons la symétrie centrale par rapport à O. Alors

$$\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k} \quad \text{et} \quad \vec{r}' = -x\vec{i} - y\vec{j} - z\vec{k} \quad (\text{B}_2.32)$$

et les angles sont liés par

$$\theta' = \pi - \theta \quad \text{et} \quad \phi' = \pi + \phi. \quad (\text{B}_2.33)$$

À partir des relations entre les angles, nous pouvons écrire

$$Y_{\lambda\mu}(\theta', \phi') = (-1)^\lambda Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi), \quad (\text{B}_2.34)$$

et par conséquent

$$\text{Re} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) (1 - (-1)^\lambda), \quad (\text{B}_2.35)$$

ou encore

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} (\text{Re} \alpha_\lambda^\mu \text{Re} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) - \text{Im} \alpha_\lambda^\mu \text{Im} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)) (1 - (-1)^\lambda) = 0; \quad (\text{B}_2.36)$$

et finalement

$$\sum_{\substack{\lambda=0 \\ \lambda \text{ impair}}}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \text{Re} \alpha_\lambda^\mu \text{Re} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) - \sum_{\substack{\lambda=0 \\ \lambda \text{ impair}}}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \text{Im} \alpha_\lambda^\mu \text{Im} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = 0, \quad (\text{B}_2.37)$$

égalité qui doit être vraie quels que soient  $\theta$  et  $\phi$ . Par conséquent, comme annoncé dans le théorème 8 p. 59, si le point O est centre de symétrie de la forme du noyau, alors les coordonnées de forme doivent vérifier que

$$(2.6.8) \quad \alpha_\lambda^\mu = 0 \text{ si } \lambda \text{ impair}$$

et

$$F(\theta, \phi; \alpha) = 1 + \text{Re} \sum_{\substack{\lambda=0 \\ \lambda \text{ pair}}}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^\mu Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi). \quad (\text{B}_2.38)$$

# Annexe C<sub>2</sub>

## Invariance de la distance

Nous voulons vérifier l'égalité entre

$$\text{dist}_\Sigma(\vec{r}'; \alpha) \quad \text{et} \quad \text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha),$$

où  $\vec{r}'$  est le point symétrique par un ou plusieurs plans de symétrie parmi  $(xOy)$ ,  $(yOz)$  et  $(zOx)$  sachant que, p. 56,

$$(2.4.14) \quad \text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha) = \sqrt{r^2 + R^2(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) - 2\vec{r} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha)R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)}.$$

La vérification de l'égalité des deux distances passe par la vérification de celle entre

$$\vec{r}' \cdot \vec{n}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \quad \text{et} \quad \vec{r} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha).$$

Si le plan  $(xOy)$  est plan de symétrie, alors

$$\vec{r}' = x\vec{i} + y\vec{j} - z\vec{k} \tag{C2.1}$$

et

$$\vec{n}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = \vec{n}(\pi - \theta_\alpha, \phi_\alpha) = \sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha \vec{i} + \sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha \vec{j} - \cos \theta_\alpha \vec{k}, \tag{C2.2}$$

d'où

$$\vec{r}' \cdot \vec{n}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = x \sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha + y \sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha + (-z) \times (-\cos \theta_\alpha) = \vec{r} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha). \tag{C2.3}$$

Si le plan  $(yOz)$  est plan de symétrie, alors

$$\vec{r}' = -x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k} \tag{C2.4}$$

et

$$\vec{n}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = \vec{n}(\theta_\alpha, \frac{\pi}{3\pi}) - \phi_\alpha = -\sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha \vec{i} + \sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha \vec{j} + \cos \theta_\alpha \vec{k}, \tag{C2.5}$$

d'où

$$\vec{r}' \cdot \vec{n}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = (-x) \times (-\sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha) + y \sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha + z \cos \theta_\alpha = \vec{r} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha). \tag{C2.6}$$

Si le plan  $(zOx)$  est plan de symétrie, alors

$$\vec{r}' = x\vec{i} - y\vec{j} + z\vec{k} \quad (\text{C}_2.7)$$

et

$$\vec{n}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = \vec{n}(\theta_\alpha, 2\pi - \phi_\alpha) = \sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha \vec{i} - \sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha \vec{j} + \cos \theta_\alpha \vec{k}, \quad (\text{C}_2.8)$$

d'où

$$\vec{r}' \cdot \vec{n}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = x \sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha + (-y) \times (-\sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha) + z \cos \theta_\alpha = \vec{r} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha). \quad (\text{C}_2.9)$$

Nous avons ainsi démontré que dans le cas des plans de symétrie  $(xOy)$ ,  $(yOz)$  et  $(zOx)$

$$(2.7.8) \quad \text{dist}_\Sigma(\vec{r}'; \alpha) = \text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha).$$

C'est le théorème 10 p. 62.

## Annexe D<sub>2</sub>

### Invariance des dérivées de la distance

Nous voulons montrer le lien entre

$$\frac{\partial \text{dist}_\Sigma(\vec{r}'; \alpha)}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} \quad \text{et} \quad \frac{\partial \text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}}$$

en présence des plans de symétrie  $(xOy)$ ,  $(yOz)$  et  $(zOx)$ , en n'oubliant pas que nous imposons toujours la présence du dernier pour avoir des coordonnées de forme réelle. En utilisant quelques résultats antérieurs, à savoir, pp. 61-62,

$$(2.7.5) \quad R(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha; \alpha) = R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha),$$

$$(2.7.7) \quad \vec{r}' \cdot \vec{n}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = \vec{r} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha),$$

$$(2.7.8) \quad \text{dist}_\Sigma(\vec{r}'; \alpha) = \text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha),$$

et avec le lemme 8 p. 63

$$(2.7.17) \quad \begin{aligned} \frac{\partial \text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} &= - \frac{\vec{r} - \vec{R}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)}{\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) R_0 \frac{\partial c}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}}(\alpha) F(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) \\ &\quad - \frac{\vec{r} - \vec{R}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)}{\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) R_0 c(\alpha) [\text{Re } Y_{\lambda\mu}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) + G_{\lambda\mu}(\alpha)] \\ &\quad - \left[ \vec{r} \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) \frac{\partial \theta_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} + \vec{r} \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} \right] \frac{R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)}{\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)}, \end{aligned}$$

nous constatons que nous pouvons remplacer la plupart des grandeurs symétriques par leur grandeur d'origine et nous avons déjà

$$\frac{\partial \text{dist}_\Sigma(\vec{r}'; \alpha)}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} = - \frac{\vec{r} - \vec{R}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)}{\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) R_0 \frac{\partial c}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}}(\alpha) F(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{\vec{r} - \vec{R}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)}{\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) R_0 c(\alpha) [\text{Re } Y_{\lambda\mu}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) + G'_{\lambda\mu}(\alpha)] \\
& - \left[ \vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \theta'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} + \vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \phi'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} \right] \frac{R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)}{\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)}. \quad (\text{D}_2.1)
\end{aligned}$$

Il reste à examiner, dans chaque cas de symétrie, l'invariance de  $G'_{\lambda\mu}(\alpha)$ , de  $\text{Re } Y_{\lambda\mu}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha)$  et de  $\vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \theta'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} + \vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \phi'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}}$ .

Pour vérifier l'invariance de  $\vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \theta'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} + \vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \phi'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}}$ , nous rappelons d'abord que

$$\frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta, \phi) = \cos \theta \cos \phi \vec{i} + \cos \theta \sin \phi \vec{j} - \sin \theta \vec{k} \quad (\text{D}_2.2)$$

et

$$\frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta, \phi) = -\sin \theta \sin \phi \vec{i} + \sin \theta \cos \phi \vec{j}, \quad (\text{D}_2.3)$$

d'où

$$\begin{aligned}
\vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) \frac{\partial \theta_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} + \vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} &= (x \cos \theta_\alpha \cos \phi_\alpha + y \cos \theta_\alpha \sin \phi_\alpha - z \sin \theta_\alpha) \frac{\partial \theta_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} \\
&+ (-x \sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha + y \sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha) \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}}. \quad (\text{D}_2.4)
\end{aligned}$$

En effectuant patiemment les calculs, nous vérifions que, quels que soient les plans de symétrie

$$\vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \theta'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} + \vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \phi'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} = \vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) \frac{\partial \theta_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} + \vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}}. \quad (\text{D}_2.5)$$

En effet, si  $(xOy)$  est plan de symétrie,

$$\vec{r}' = x \vec{i} + y \vec{j} - z \vec{k}, \quad \theta'_\alpha = \pi - \theta_\alpha \quad \text{et} \quad \phi'_\alpha = \phi_\alpha \quad (\text{D}_2.6)$$

$$\frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = -\cos \theta_\alpha \cos \phi_\alpha \vec{i} - \cos \theta_\alpha \sin \phi_\alpha \vec{j} - \sin \theta_\alpha \vec{k}, \quad (\text{D}_2.7)$$

$$\frac{\partial \theta'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} = -\frac{\partial \theta_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}}, \quad (\text{D}_2.8)$$

$$\frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = -\sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha \vec{i} + \sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha \vec{j}, \quad (\text{D}_2.9)$$

$$\frac{\partial \phi'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} = \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}}, \quad (\text{D}_2.10)$$

puis

$$\begin{aligned}
\vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \theta'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} + \vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \phi'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} &= (-x \cos \theta_\alpha \cos \phi_\alpha - y \cos \theta_\alpha \sin \phi_\alpha + z \sin \theta_\alpha) \\
&\times \left( -\frac{\partial \theta_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}} \right) + (-x \sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha + y \sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha) \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda\mu}}, \quad (\text{D}_2.11)
\end{aligned}$$

qui permet de voir l'invariance recherchée dans ce cas de symétrie.

Maintenant si  $(yOz)$  est plan de symétrie,

$$\vec{r}' = -x \vec{i} + y \vec{j} + z \vec{k}, \quad \theta'_\alpha = \theta_\alpha \quad \text{et} \quad \phi'_\alpha = \frac{\pi}{3\pi} \} - \phi_\alpha \quad (\text{D}_2.12)$$

$$\frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = -\cos \theta_\alpha \cos \phi_\alpha \vec{i} + \cos \theta_\alpha \sin \phi_\alpha \vec{j} - \sin \theta_\alpha \vec{k}, \quad (\text{D}_2.13)$$

$$\frac{\partial \theta'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} = \frac{\partial \theta_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}}, \quad (\text{D}_2.14)$$

$$\frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = -\sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha \vec{i} - \sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha \vec{j}, \quad (\text{D}_2.15)$$

$$\frac{\partial \phi'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} = -\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}}, \quad (\text{D}_2.16)$$

puis

$$\begin{aligned} \vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \theta'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} + \vec{r}' \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \phi'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} &= (x \cos \theta_\alpha \cos \phi_\alpha + y \cos \theta_\alpha \sin \phi_\alpha - z \sin \theta_\alpha) \frac{\partial \theta_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} \\ &+ (x \sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha - y \sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha) \times \left( -\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} \right), \quad (\text{D}_2.17) \end{aligned}$$

qui permet de voir l'invariance recherchée dans ce cas de symétrie.

Enfin, puisque  $(zOx)$  est plan de symétrie,

$$\vec{r}' = x \vec{i} - y \vec{j} + z \vec{k}, \quad (\text{D}_2.18)$$

$$\frac{\partial \vec{n}}{\partial \theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = \cos \theta_\alpha \cos \phi_\alpha \vec{i} - \cos \theta_\alpha \sin \phi_\alpha \vec{j} - \sin \theta_\alpha \vec{k}, \quad (\text{D}_2.19)$$

$$\frac{\partial \theta'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} = \frac{\partial \theta_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}}, \quad (\text{D}_2.20)$$

$$\frac{\partial \vec{n}}{\partial \phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = \sin \theta_\alpha \sin \phi_\alpha \vec{i} + \sin \theta_\alpha \cos \phi_\alpha \vec{j}, \quad (\text{D}_2.21)$$

$$\frac{\partial \phi'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} = -\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}}, \quad (\text{D}_2.22)$$

qui permet de voir, exactement comme dans le cas précédent, l'invariance recherchée dans ce cas de symétrie.

Il reste à examiner dans chaque cas de symétrie l'invariance de  $G'_{\lambda\mu}(\alpha)$  et  $\text{Re} Y_{\lambda\mu}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha)$ . Nous trouvons quels que soient les plans de symétrie présents

$$G'_{\lambda\mu}(\alpha) = G_{\lambda\mu}(\alpha). \quad (\text{D}_2.23)$$

En effet, si  $(xOy)$  est plan de symétrie alors

$$G'_{\lambda\mu}(\alpha) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\substack{\rho=-\nu \\ \nu-\rho \text{ pair}}}^{\nu} \alpha_{\nu\rho} \left( \frac{\partial \text{Re} Y_{\nu\rho}}{\partial \theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \theta'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} + \frac{\partial \text{Re} Y_{\nu\rho}}{\partial \phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial \phi'_\alpha}{\partial \alpha_{\lambda^\mu}} \right) = G_{\lambda\mu}(\alpha) \quad (\text{D}_2.24)$$

car

$$\frac{\partial Y_{\nu\rho}}{\partial\theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = -(-1)^{\nu-\rho} \frac{\partial Y_{\nu\rho}}{\partial\theta}(\theta_\alpha, \phi_\alpha), \quad \text{avec} \quad \frac{\partial\theta'_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} = -\frac{\partial\theta_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}}, \quad (\text{D}_2.25)$$

$$\frac{\partial Y_{\nu\rho}}{\partial\phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = (-1)^{\nu-\rho} \frac{\partial Y_{\nu\rho}}{\partial\phi}(\theta_\alpha, \phi_\alpha), \quad \text{avec} \quad \frac{\partial\phi'_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} = \frac{\partial\phi_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}}. \quad (\text{D}_2.26)$$

Maintenant si  $(yOz)$  est plan de symétrie,

$$G'_{\lambda\mu}(\alpha) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\substack{\rho=-\nu \\ \rho \text{ pair}}}^{\nu} \alpha_{\nu}{}^{\rho} \left( \frac{\partial \text{Re} Y_{\nu\rho}}{\partial\theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial\theta'_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} + \frac{\partial \text{Re} Y_{\nu\rho}}{\partial\phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial\phi'_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} \right) = G_{\lambda\mu}(\alpha) \quad (\text{D}_2.27)$$

car

$$\frac{\partial Y_{\nu\rho}}{\partial\theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = (-1)^\rho \frac{\partial Y_{\nu\rho}^*}{\partial\theta}(\theta_\alpha, \phi_\alpha), \quad \text{avec} \quad \frac{\partial\theta'_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} = \frac{\partial\theta_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}}, \quad (\text{D}_2.28)$$

$$\frac{\partial Y_{\nu\rho}}{\partial\phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = -(-1)^\rho \frac{\partial Y_{\nu\rho}^*}{\partial\phi}(\theta_\alpha, \phi_\alpha), \quad \text{avec} \quad \frac{\partial\phi'_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} = -\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}}. \quad (\text{D}_2.29)$$

Enfin, puisque  $(zOx)$  est plan de symétrie,

$$G'_{\lambda\mu}(\alpha) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\rho=-\nu}^{\nu} \alpha_{\nu}{}^{\rho} \left( \frac{\partial \text{Re} Y_{\nu\rho}}{\partial\theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial\theta'_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} + \frac{\partial \text{Re} Y_{\nu\rho}}{\partial\phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) \frac{\partial\phi'_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} \right) = G_{\lambda\mu}(\alpha) \quad (\text{D}_2.30)$$

car

$$\frac{\partial Y_{\nu\rho}}{\partial\theta}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = \frac{\partial Y_{\nu\rho}^*}{\partial\theta}(\theta_\alpha, \phi_\alpha), \quad \text{avec} \quad \frac{\partial\theta'_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} = \frac{\partial\theta_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}}, \quad (\text{D}_2.31)$$

$$\frac{\partial Y_{\nu\rho}}{\partial\phi}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = -\frac{\partial Y_{\nu\rho}^*}{\partial\phi}(\theta_\alpha, \phi_\alpha), \quad \text{avec} \quad \frac{\partial\phi'_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} = -\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}}. \quad (\text{D}_2.32)$$

Si nous récapitulons, nous sommes arrivés à

$$\begin{aligned} \frac{\partial \text{dist}_\Sigma(\vec{r}'; \alpha)}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} &= -\frac{\vec{r} - \vec{R}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)}{\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) R_0 \frac{\partial c}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}}(\alpha) F(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha) \\ &\quad - \frac{\vec{r} - \vec{R}(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha)}{\text{dist}_\Sigma(\vec{r}; \alpha)} \cdot \vec{n}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) R_0 c(\alpha) [\text{Re} Y_{\lambda\mu}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) + G_{\lambda\mu}(\alpha)] \\ &\quad - \left[ \vec{r} \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial\theta}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) \frac{\partial\theta_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} + \vec{r} \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial\phi}(\theta_\alpha, \phi_\alpha) \frac{\partial\phi_\alpha}{\partial\alpha_{\lambda^\mu}} \right] R(\theta_\alpha, \phi_\alpha; \alpha), \quad (\text{D}_2.33) \end{aligned}$$

où il ne reste plus qu'à étudier l'invariance du terme  $\text{Re} Y_{\lambda\mu}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha)$  selon les cas. Or, nous savons que

$$\text{si } (xOy) \text{ est plan de symétrie, } Y_{\lambda\mu}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = (-1)^{\lambda-\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta_\alpha, \phi_\alpha), \quad (\text{D}_2.34)$$



$$\text{si } (yOz) \text{ est plan de symétrie, } Y_{\lambda\mu}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = (-1)^\mu Y_{\lambda\mu}^*(\theta_\alpha, \phi_\alpha), \quad (\text{D}_2.35)$$

$$\text{si } (zOx) \text{ est plan de symétrie, } Y_{\lambda\mu}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = Y_{\lambda\mu}^*(\theta_\alpha, \phi_\alpha). \quad (\text{D}_2.36)$$

Par conséquent

$$\text{si } (xOy) \text{ est plan de symétrie, } \text{Re } Y_{\lambda\mu}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = (-1)^{\lambda-\mu} \text{Re } Y_{\lambda\mu}(\theta_\alpha, \phi_\alpha), \quad (\text{D}_2.37)$$

$$\text{si } (yOz) \text{ est plan de symétrie, } \text{Re } Y_{\lambda\mu}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = (-1)^\mu \text{Re } Y_{\lambda\mu}(\theta_\alpha, \phi_\alpha), \quad (\text{D}_2.38)$$

$$\text{si } (zOx) \text{ est plan de symétrie, } \text{Re } Y_{\lambda\mu}(\theta'_\alpha, \phi'_\alpha) = \text{Re } Y_{\lambda\mu}(\theta_\alpha, \phi_\alpha). \quad (\text{D}_2.39)$$

Nous avons ainsi démontré qu'une partie de la dérivée de la distance n'est pas invariante par les plans de symétrie  $(xOy)$ ,  $(yOz)$  et cela nous conduit au théorème 11 p. 63.



# Annexe E<sub>2</sub>

## Quelques tables de caractères

Les représentations irréductibles sont désignées selon la notation de Robert MULLIKEN. Les lettres A et B correspondent aux représentations de dimension 1. Les lettres E, F, G, H et I correspondent respectivement aux représentations de dimension 2, 3, 4, 5 et 6. Les tables de caractères sont issues de la recomposition de plusieurs ouvrages [16], [17], [18] et [19] (bibliographie p. 103). Elles sont données *in extenso* pour quelques groupes simples et doubles. La table de caractères d'un groupe simple est contenue dans celle du groupe double associé, dans le quart en haut à gauche. Quand il y a des différences, elles sont annoncées entre crochets pour le groupe simple. Les représentations dédoublées situées dans la partie inférieure de la table sont désignées avec la notation de MULLIKEN et sont primées.

| $I_h^D$   | 1   | 12       | 12       | 20    | 30[15] | 1   | 12       | 12         | 20    | 30[15]   | 1   | 12       | 12       | 20     | 1    | 12        | 12          | 20     |
|-----------|-----|----------|----------|-------|--------|-----|----------|------------|-------|----------|-----|----------|----------|--------|------|-----------|-------------|--------|
| $[I_h]$   | $E$ | $C_5$    | $C_5^2$  | $C_3$ | $C_2$  | $i$ | $S_{10}$ | $S_{10}^3$ | $S_6$ | $\sigma$ | $R$ | $RC_5$   | $RC_5^2$ | $RC_3$ | $Ri$ | $RS_{10}$ | $RS_{10}^3$ | $RS_6$ |
| $A_g$     | 1   | 1        | 1        | 1     | 1      | 1   | 1        | 1          | 1     | 1        | 1   | 1        | 1        | 1      | 1    | 1         | 1           | 1      |
| $F_{1g}$  | 3   | $\phi$   | $1-\phi$ | 0     | -1     | 3   | $1-\phi$ | $\phi$     | 0     | -1       | 3   | $\phi$   | $1-\phi$ | 0      | 3    | $1-\phi$  | $\phi$      | 0      |
| $F_{2g}$  | 3   | $1-\phi$ | $\phi$   | 0     | -1     | 3   | $\phi$   | $1-\phi$   | 0     | -1       | 3   | $1-\phi$ | $\phi$   | 0      | 3    | $\phi$    | $1-\phi$    | 0      |
| $G_g$     | 4   | -1       | -1       | 1     | 0      | 4   | -1       | -1         | 1     | 0        | 4   | -1       | -1       | 1      | 4    | -1        | -1          | 1      |
| $H_g$     | 5   | 0        | 0        | -1    | 1      | 5   | 0        | 0          | -1    | 1        | 5   | 0        | 0        | -1     | 5    | 0         | 0           | -1     |
| $A_u$     | 1   | 1        | 1        | 1     | 1      | -1  | -1       | -1         | -1    | -1       | 1   | 1        | 1        | 1      | -1   | -1        | -1          | -1     |
| $F_{1u}$  | 3   | $\phi$   | $1-\phi$ | 0     | -1     | -3  | $\phi-1$ | $-\phi$    | 0     | 1        | 3   | $\phi$   | $1-\phi$ | 0      | -3   | $\phi-1$  | $-\phi$     | 0      |
| $F_{2u}$  | 3   | $1-\phi$ | $\phi$   | 0     | -1     | -3  | $-\phi$  | $\phi-1$   | 0     | 1        | 3   | $1-\phi$ | $\phi$   | 0      | -3   | $-\phi$   | $\phi-1$    | 0      |
| $G_u$     | 4   | -1       | -1       | 1     | 0      | -4  | 1        | 1          | -1    | 0        | 4   | -1       | -1       | 1      | -4   | 1         | 1           | -1     |
| $H_u$     | 5   | 0        | 0        | -1    | 1      | -5  | 0        | 0          | 1     | -1       | 5   | 0        | 0        | -1     | -5   | 0         | 0           | 1      |
| $E'_{1g}$ | 2   | $\phi$   | $\phi-1$ | 1     | 0      | 2   | $\phi$   | $\phi-1$   | 1     | 0        | -2  | $-\phi$  | $1-\phi$ | -1     | -2   | $-\phi$   | $1-\phi$    | -1     |
| $G'_{1g}$ | 4   | 1        | -1       | -1    | 0      | 4   | 1        | -1         | -1    | 0        | -4  | -1       | 1        | 1      | -4   | -1        | 1           | 1      |
| $I'_{1g}$ | 6   | -1       | 1        | 0     | 0      | 6   | -1       | 1          | 0     | 0        | -6  | 1        | -1       | 0      | -6   | 1         | -1          | 0      |
| $E'_{2g}$ | 2   | $1-\phi$ | $-\phi$  | 1     | 0      | 2   | $1-\phi$ | $-\phi$    | -1    | 0        | -2  | $\phi-1$ | $\phi$   | -1     | -2   | $\phi-1$  | $\phi$      | +1     |
| $E'_{1u}$ | 2   | $\phi$   | $\phi-1$ | 1     | 0      | -2  | $-\phi$  | $1-\phi$   | -1    | 0        | -2  | $-\phi$  | $1-\phi$ | -1     | 2    | $\phi$    | $\phi-1$    | 1      |
| $G'_{1u}$ | 4   | 1        | -1       | -1    | 0      | -4  | -1       | 1          | 1     | 0        | -4  | -1       | 1        | 1      | 4    | 1         | -1          | -1     |
| $I'_{1u}$ | 6   | -1       | 1        | 0     | 0      | -6  | 1        | -1         | 0     | 0        | -6  | 1        | -1       | 0      | 6    | -1        | 1           | 0      |
| $E'_{2u}$ | 2   | $1-\phi$ | $-\phi$  | 1     | 0      | -2  | $\phi-1$ | $\phi$     | -1    | 0        | -2  | $\phi-1$ | $\phi$   | -1     | 2    | $1-\phi$  | $-\phi$     | 1      |

Tableau E<sub>2.1</sub> – Table de caractères du groupe icosaédrique associé à l'icosaèdre et au dodécaèdre

Le nombre  $\phi$  est le nombre d'or. Il vérifie les propriétés suivantes

$$\phi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} = 2 \cos\left(\frac{\pi}{5}\right), \quad (\text{E}_2.1)$$

$$1 - \phi = \frac{1 - \sqrt{5}}{2} = 2 \cos\left(\frac{3\pi}{5}\right), \quad (\text{E}_2.2)$$

$$\phi(1 - \phi) = -1. \quad (\text{E}_2.3)$$

| $O_h^D$   | 1   | 8     | 6[3]  | 6           | 12[6]  | 1   | 8     | 6[3]       | 6           | 12[6]      | 1   | 8      | 6           | 1    | 8      | 6           |
|-----------|-----|-------|-------|-------------|--------|-----|-------|------------|-------------|------------|-----|--------|-------------|------|--------|-------------|
| [ $O_h$ ] | $E$ | $C_3$ | $C_2$ | $C_4$       | $C'_2$ | $i$ | $S_6$ | $\sigma_h$ | $S_4$       | $\sigma_d$ | $R$ | $RC_3$ | $RC_4$      | $Ri$ | $RS_6$ | $RS_4$      |
| $A_{1g}$  | 1   | 1     | 1     | 1           | 1      | 1   | 1     | 1          | 1           | 1          | 1   | 1      | 1           | 1    | 1      | 1           |
| $A_{2g}$  | 1   | 1     | 1     | -1          | -1     | 1   | 1     | 1          | -1          | -1         | 1   | 1      | -1          | 1    | 1      | -1          |
| $E_g$     | 2   | -1    | 2     | 0           | 0      | 2   | -1    | 2          | 0           | 0          | 2   | -1     | 0           | 2    | -1     | 0           |
| $F_{1g}$  | 3   | 0     | -1    | 1           | -1     | 3   | 0     | -1         | 1           | -1         | 3   | 0      | 1           | 3    | 0      | 1           |
| $F_{2g}$  | 3   | 0     | -1    | -1          | 1      | 3   | 0     | -1         | -1          | 1          | 3   | 0      | -1          | 3    | 0      | -1          |
| $A_{1u}$  | 1   | 1     | 1     | 1           | 1      | -1  | -1    | -1         | -1          | -1         | 1   | 1      | 1           | -1   | -1     | -1          |
| $A_{2u}$  | 1   | 1     | 1     | -1          | -1     | -1  | -1    | -1         | 1           | 1          | 1   | 1      | -1          | -1   | -1     | 1           |
| $E_u$     | 2   | -1    | 2     | 0           | 0      | -2  | 1     | -2         | 0           | 0          | 2   | -1     | 0           | -2   | 0      | 0           |
| $F_{1u}$  | 3   | 0     | -1    | 1           | -1     | -3  | 0     | 1          | -1          | 1          | 3   | 0      | 1           | -3   | 0      | -1          |
| $F_{2u}$  | 3   | 0     | -1    | -1          | 1      | -3  | 0     | 1          | 1           | -1         | 3   | 0      | -1          | -3   | 0      | 1           |
| $E'_{1g}$ | 2   | 1     | 0     | $\sqrt{2}$  | 0      | 2   | 1     | 0          | $\sqrt{2}$  | 0          | -2  | -1     | $-\sqrt{2}$ | -2   | -1     | $-\sqrt{2}$ |
| $E'_{2g}$ | 2   | 1     | 0     | $-\sqrt{2}$ | 0      | 2   | 1     | 0          | $-\sqrt{2}$ | 0          | -2  | -1     | $\sqrt{2}$  | -2   | -1     | $\sqrt{2}$  |
| $G'_g$    | 4   | -1    | 0     | 0           | 0      | 4   | -1    | 0          | 0           | 0          | -4  | 1      | 0           | -4   | -1     | 0           |
| $E'_{1u}$ | 2   | 1     | 0     | $\sqrt{2}$  | 0      | -2  | -1    | 0          | $-\sqrt{2}$ | 0          | -2  | -1     | $-\sqrt{2}$ | 2    | 1      | $\sqrt{2}$  |
| $E'_{2u}$ | 2   | 1     | 0     | $-\sqrt{2}$ | 0      | -2  | -1    | 0          | $\sqrt{2}$  | 0          | -2  | -1     | $\sqrt{2}$  | 2    | 1      | $-\sqrt{2}$ |
| $G'_u$    | 4   | -1    | 0     | 0           | 0      | -4  | 1     | 0          | 0           | 0          | -4  | 1      | 0           | 4    | 1      | 0           |

Tableau E<sub>2.2</sub> – Table de caractères du groupe octaédrique associé à l'octaèdre et au cube

| $T_d^D$ | 1   | 8     | 6[3]  | 6           | 12[6]      | 1   | 8      | 6           |
|---------|-----|-------|-------|-------------|------------|-----|--------|-------------|
| $[T_d]$ | $E$ | $C_3$ | $C_2$ | $S_4$       | $\sigma_d$ | $R$ | $RC_3$ | $RS_4$      |
| $A_1$   | 1   | 1     | 1     | 1           | 1          | 1   | 1      | 1           |
| $A_2$   | 1   | 1     | 1     | -1          | -1         | 1   | 1      | -1          |
| $E$     | 2   | -1    | 2     | 0           | 0          | 2   | -1     | 0           |
| $F_1$   | 3   | 0     | -1    | 1           | -1         | 3   | 0      | 1           |
| $F_2$   | 3   | 0     | -1    | -1          | 1          | 3   | 0      | -1          |
| $E'_1$  | 2   | 1     | 0     | $\sqrt{2}$  | 0          | -2  | -1     | $-\sqrt{2}$ |
| $E'_2$  | 2   | 1     | 0     | $-\sqrt{2}$ | 0          | -2  | -1     | $\sqrt{2}$  |
| $G'$    | 4   | -1    | 0     | 0           | 0          | -4  | 1      | 0           |

Tableau E<sub>2.3</sub> – Table de caractères du groupe tétraédrique associé au tétraèdre

| $D_{2h}^D$ | 1   | 2[1]     | 2[1]     | 2[1]     | 1   | 2[1]         | 2[1]         | 2[1]         | 1   | 1    |
|------------|-----|----------|----------|----------|-----|--------------|--------------|--------------|-----|------|
| $[D_{2h}]$ | $E$ | $C_2(z)$ | $C_2(y)$ | $C_2(x)$ | $i$ | $\sigma(xy)$ | $\sigma(zx)$ | $\sigma(yz)$ | $R$ | $Ri$ |
| $A_g$      | 1   | 1        | 1        | 1        | 1   | 1            | 1            | 1            | 1   | 1    |
| $B_{1g}$   | 1   | 1        | -1       | -1       | 1   | 1            | -1           | -1           | 1   | 1    |
| $B_{2g}$   | 1   | -1       | 1        | -1       | 1   | -1           | 1            | -1           | 1   | 1    |
| $B_{3g}$   | 1   | -1       | -1       | 1        | 1   | -1           | -1           | 1            | 1   | 1    |
| $A_u$      | 1   | 1        | 1        | 1        | -1  | -1           | -1           | -1           | 1   | -1   |
| $B_{1u}$   | 1   | 1        | -1       | -1       | -1  | -1           | 1            | 1            | 1   | -1   |
| $B_{2u}$   | 1   | -1       | 1        | -1       | -1  | 1            | -1           | 1            | 1   | -1   |
| $B_{3u}$   | 1   | -1       | -1       | 1        | -1  | 1            | 1            | -1           | 1   | -1   |
| $E'_1$     | 2   | 0        | 0        | 0        | 2   | 0            | 0            | 0            | -2  | -2   |
| $E'_2$     | 2   | 0        | 0        | 0        | -2  | 0            | 0            | 0            | -2  | 2    |

Tableau E<sub>2.4</sub> – Table de caractères du groupe  $D_{2h}$

| $C_{2v}^D$ | 1   | 2[1]  | 2[1]           | 2[1]           | 1   |
|------------|-----|-------|----------------|----------------|-----|
| $[C_{2v}]$ | $E$ | $C_2$ | $\sigma_v(zx)$ | $\sigma_v(yz)$ | $R$ |
| $A_1$      | 1   | 1     | 1              | 1              | 1   |
| $A_2$      | 1   | 1     | -1             | -1             | 1   |
| $B_1$      | 1   | -1    | 1              | -1             | 1   |
| $B_2$      | 1   | -1    | -1             | 1              | 1   |
| $E'$       | 2   | 0     | 0              | 0              | -2  |

Tableau E<sub>2.5</sub> – Table de caractères du groupe  $C_{2v}$

|                  |          |                   |                 |          |            |          |                    |                  |          |
|------------------|----------|-------------------|-----------------|----------|------------|----------|--------------------|------------------|----------|
| $C_{\infty v}^D$ | 1        | 2                 | 2               | $\dots$  | $\infty$   | 1        | 2                  | 2                | $\dots$  |
| $[C_{\infty v}]$ | $E$      | $C(\phi)$         | $C(2\phi)$      | $\dots$  | $\sigma_v$ | $R$      | $RC(\phi)$         | $RC(2\phi)$      | $\dots$  |
| $A_1$            | 1        | 1                 | 1               | $\dots$  | 1          | 1        | 1                  | 1                | $\dots$  |
| $A_2$            | 1        | 1                 | 1               | $\dots$  | -1         | 1        | 1                  | 1                | $\dots$  |
| $E_1$            | 2        | $2 \cos(\phi)$    | $2 \cos(2\phi)$ | $\dots$  | 0          | 2        | $2 \cos(\phi)$     | $2 \cos(2\phi)$  | $\dots$  |
| $E_2$            | 2        | $2 \cos(2\phi)$   | $2 \cos(4\phi)$ | $\dots$  | 0          | 2        | $2 \cos(2\phi)$    | $2 \cos(4\phi)$  | $\dots$  |
| $\vdots$         | $\vdots$ | $\vdots$          | $\vdots$        | $\ddots$ | $\vdots$   | $\vdots$ | $\vdots$           | $\vdots$         | $\ddots$ |
| $E'_1$           | 2        | $2 \cos(\phi/2)$  | $2 \cos(\phi)$  | $\dots$  | 0          | -2       | $-2 \cos(\phi/2)$  | $-2 \cos(\phi)$  | $\dots$  |
| $E'_2$           | 2        | $2 \cos(3\phi/2)$ | $2 \cos(3\phi)$ | $\dots$  | 0          | -2       | $-2 \cos(3\phi/2)$ | $-2 \cos(3\phi)$ | $\dots$  |
| $E'_3$           | 2        | $2 \cos(5\phi/2)$ | $2 \cos(5\phi)$ | $\dots$  | 0          | -2       | $-2 \cos(5\phi/2)$ | $-2 \cos(5\phi)$ | $\dots$  |
| $\vdots$         | $\vdots$ | $\vdots$          | $\vdots$        | $\ddots$ | $\vdots$   | $\vdots$ | $\vdots$           | $\vdots$         | $\ddots$ |

Tableau E<sub>2.6</sub> – Table de caractères du groupe  $C_{\infty v}$

| $D_{\infty h}^D$ | 1        | 2                 | 2               | $\infty$   | 1        | 2                   | 2                 | $\infty$ | 1        | 2                  | 2                | $\infty$   | 1                   | 2                 | 2                 | $\infty$ |
|------------------|----------|-------------------|-----------------|------------|----------|---------------------|-------------------|----------|----------|--------------------|------------------|------------|---------------------|-------------------|-------------------|----------|
| $[D_{\infty h}]$ | $E$      | $C(\phi)$         | $C(2\phi)$      | $\sigma_v$ | $i$      | $S(\phi)$           | $S(2\phi)$        | $C_2'$   | $R$      | $RC(\phi)$         | $RC(2\phi)$      | $R\hat{i}$ | $RS(\phi)$          | $RS(2\phi)$       | $RS(2\phi)$       | $\dots$  |
| $A_{1g}$         | 1        | 1                 | 1               | 1          | 1        | 1                   | 1                 | 1        | 1        | 1                  | 1                | 1          | 1                   | 1                 | 1                 | $\dots$  |
| $A_{2g}$         | 1        | 1                 | 1               | -1         | 1        | 1                   | 1                 | -1       | 1        | 1                  | 1                | 1          | 1                   | 1                 | 1                 | $\dots$  |
| $E_{1g}$         | 2        | $2 \cos(\phi)$    | $2 \cos(2\phi)$ | 0          | 2        | $-2 \cos(\phi)$     | $-2 \cos(2\phi)$  | 0        | 2        | $2 \cos(\phi)$     | $2 \cos(2\phi)$  | 2          | $-2 \cos(\phi)$     | $-2 \cos(2\phi)$  | $-2 \cos(2\phi)$  | $\dots$  |
| $E_{2g}$         | 2        | $2 \cos(2\phi)$   | $2 \cos(4\phi)$ | 0          | 2        | $-2 \cos(2\phi)$    | $-2 \cos(4\phi)$  | 0        | 2        | $2 \cos(2\phi)$    | $2 \cos(4\phi)$  | 2          | $-2 \cos(2\phi)$    | $-2 \cos(4\phi)$  | $-2 \cos(4\phi)$  | $\dots$  |
| $\vdots$         | $\vdots$ | $\vdots$          | $\vdots$        | $\vdots$   | $\vdots$ | $\vdots$            | $\vdots$          | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$           | $\vdots$         | $\vdots$   | $\vdots$            | $\vdots$          | $\vdots$          | $\vdots$ |
| $A_{1u}$         | 1        | 1                 | 1               | 1          | -1       | -1                  | -1                | -1       | 1        | 1                  | 1                | $\dots$    | -1                  | -1                | -1                | $\dots$  |
| $A_{2u}$         | 1        | 1                 | 1               | -1         | -1       | -1                  | -1                | 1        | 1        | 1                  | 1                | $\dots$    | -1                  | -1                | -1                | $\dots$  |
| $E_{1u}$         | 2        | $2 \cos(\phi)$    | $2 \cos(2\phi)$ | 0          | -2       | $2 \cos(\phi)$      | $2 \cos(2\phi)$   | 0        | 2        | $2 \cos(\phi)$     | $2 \cos(2\phi)$  | $\dots$    | $2 \cos(\phi)$      | $2 \cos(2\phi)$   | $2 \cos(2\phi)$   | $\dots$  |
| $E_{2u}$         | 2        | $2 \cos(2\phi)$   | $2 \cos(4\phi)$ | 0          | -2       | $-2 \cos(2\phi)$    | $-2 \cos(4\phi)$  | 0        | 2        | $2 \cos(2\phi)$    | $2 \cos(4\phi)$  | $\dots$    | $-2 \cos(2\phi)$    | $-2 \cos(4\phi)$  | $-2 \cos(4\phi)$  | $\dots$  |
| $\vdots$         | $\vdots$ | $\vdots$          | $\vdots$        | $\vdots$   | $\vdots$ | $\vdots$            | $\vdots$          | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$           | $\vdots$         | $\vdots$   | $\vdots$            | $\vdots$          | $\vdots$          | $\vdots$ |
| $E'_{1g}$        | 2        | $2 \cos(\phi/2)$  | $2 \cos(\phi)$  | 0          | 2        | $2i \cos(\phi/2)$   | $2i \cos(\phi)$   | 0        | -2       | $-2 \cos(\phi/2)$  | $-2 \cos(\phi)$  | $\dots$    | $-2i \cos(\phi/2)$  | $-2i \cos(\phi)$  | $-2i \cos(\phi)$  | $\dots$  |
| $E'_{2g}$        | 2        | $2 \cos(3\phi/2)$ | $2 \cos(3\phi)$ | 0          | 2        | $-2i \cos(3\phi/2)$ | $-2i \cos(3\phi)$ | 0        | -2       | $-2 \cos(3\phi/2)$ | $-2 \cos(3\phi)$ | $\dots$    | $2i \cos(3\phi/2)$  | $2i \cos(3\phi)$  | $2i \cos(3\phi)$  | $\dots$  |
| $E'_{3g}$        | 2        | $2 \cos(5\phi/2)$ | $2 \cos(5\phi)$ | 0          | 2        | $2i \cos(5\phi/2)$  | $2i \cos(5\phi)$  | 0        | -2       | $-2 \cos(5\phi/2)$ | $-2 \cos(5\phi)$ | $\dots$    | $-2i \cos(5\phi/2)$ | $-2i \cos(5\phi)$ | $-2i \cos(5\phi)$ | $\dots$  |
| $\vdots$         | $\vdots$ | $\vdots$          | $\vdots$        | $\vdots$   | $\vdots$ | $\vdots$            | $\vdots$          | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$           | $\vdots$         | $\vdots$   | $\vdots$            | $\vdots$          | $\vdots$          | $\vdots$ |
| $E'_{1u}$        | 2        | $2 \cos(\phi/2)$  | $2 \cos(\phi)$  | 0          | -2       | $-2i \cos(\phi/2)$  | $-2i \cos(\phi)$  | 0        | -2       | $-2 \cos(\phi/2)$  | $-2 \cos(\phi)$  | $\dots$    | $2i \cos(\phi/2)$   | $2i \cos(\phi)$   | $2i \cos(\phi)$   | $\dots$  |
| $E'_{2u}$        | 2        | $2 \cos(3\phi/2)$ | $2 \cos(3\phi)$ | 0          | -2       | $2i \cos(3\phi/2)$  | $2i \cos(3\phi)$  | 0        | -2       | $-2 \cos(3\phi/2)$ | $-2 \cos(3\phi)$ | $\dots$    | $-2i \cos(3\phi/2)$ | $-2i \cos(3\phi)$ | $-2i \cos(3\phi)$ | $\dots$  |
| $E'_{3u}$        | 2        | $2 \cos(5\phi/2)$ | $2 \cos(5\phi)$ | 0          | -2       | $-2i \cos(5\phi/2)$ | $-2i \cos(5\phi)$ | 0        | -2       | $-2 \cos(5\phi/2)$ | $-2 \cos(5\phi)$ | $\dots$    | $2i \cos(5\phi/2)$  | $2i \cos(5\phi)$  | $2i \cos(5\phi)$  | $\dots$  |
| $\vdots$         | $\vdots$ | $\vdots$          | $\vdots$        | $\vdots$   | $\vdots$ | $\vdots$            | $\vdots$          | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$           | $\vdots$         | $\vdots$   | $\vdots$            | $\vdots$          | $\vdots$          | $\vdots$ |

Tableau E<sub>2.7</sub> – Table de caractères du groupe  $D_{\infty h}$

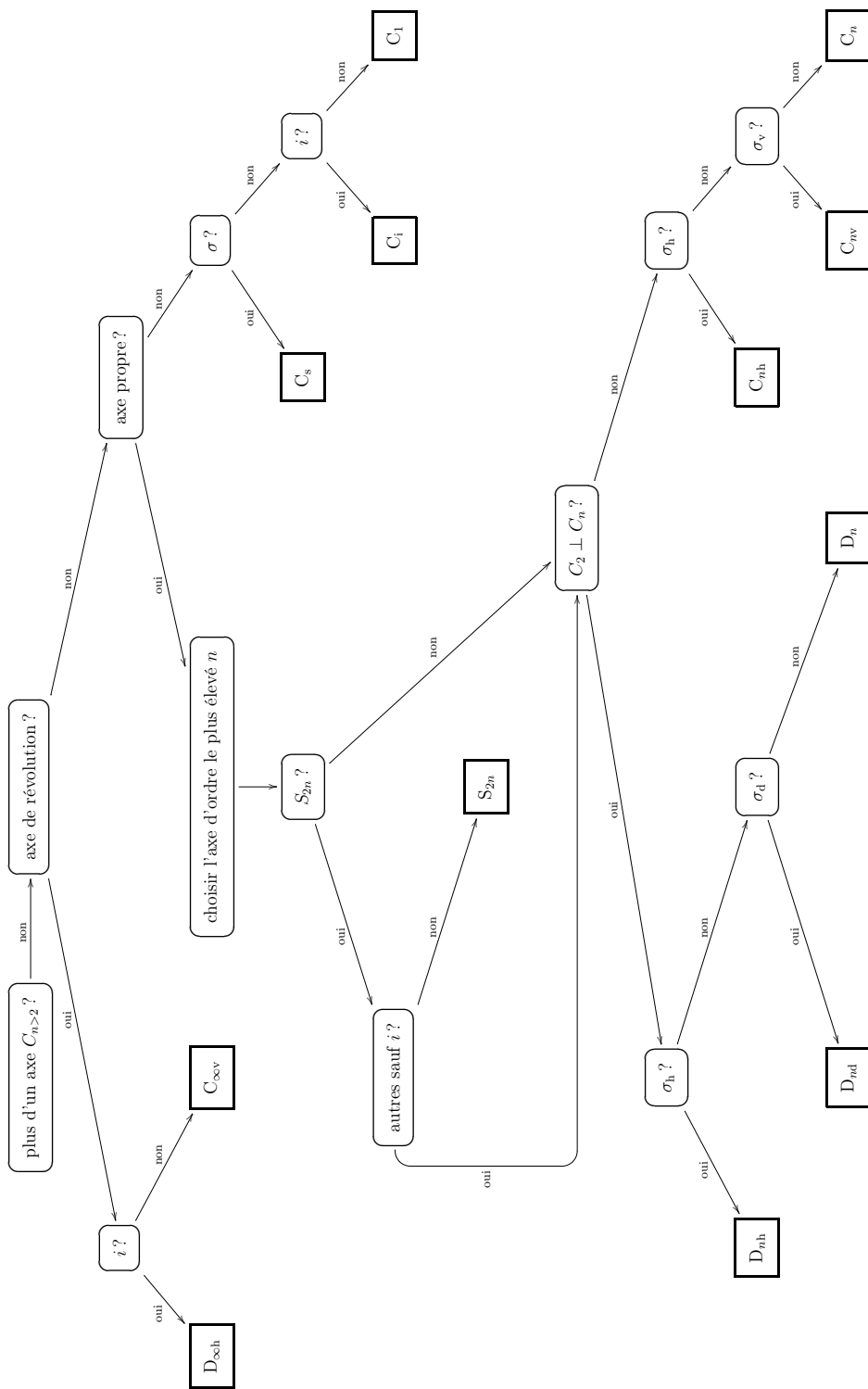


Figure E<sub>2.1</sub> – Diagramme de recherche des groupes de symétries



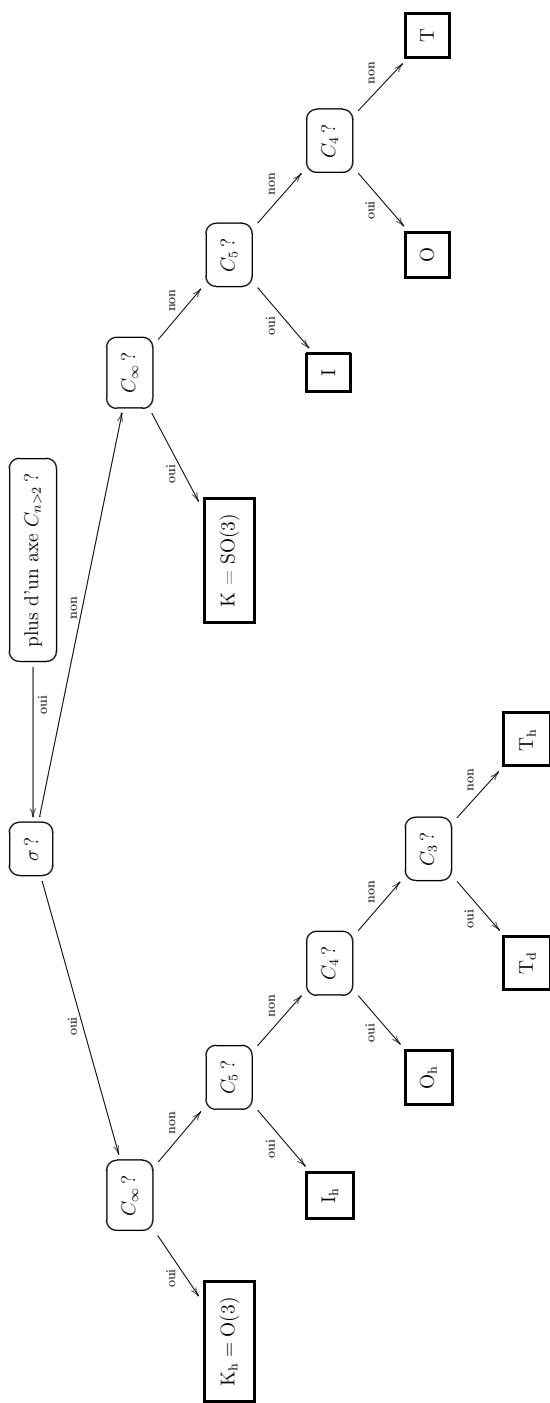


Figure E2.2 – Diagramme de recherche des groupes de symétries



## Annexe F<sub>2</sub>

### Le cas du groupe de l'icosaèdre I<sub>h</sub>

La méthode pour déterminer les contraintes entre les coordonnées de forme causées par un groupe de symétries a été donnée dans la section 2.6 p. 57. Les calculs exigent en particulier de diagonaliser des matrices de WIGNER, ce qui est fait à l'aide d'un programme de calcul formel. Il faut donc préciser les caractéristiques géométriques des éléments de symétrie comme les angles d'EULER pour les axes de rotation. Nous avons cependant quelques libertés. Comme il y a toujours au moins un plan de symétrie, nous décidons que l'un des plans de symétrie est le plan ( $zOx$ ). Ce faisant, nous simplifions notre tâche puisque les coordonnées de forme sont alors réelles. Les calculs complets pour les groupes T<sub>d</sub> et O<sub>h</sub> ont déjà été effectués et leurs résultats ont été publiés dans [14] (bibliographie p. 103). Pour le cas de la symétrie icosaédrique, une grande partie du travail a été effectuée dans [15] (bibliographie p. 103) et nous l'achevons ici. Nous utilisons les résultats de [15] p. 25 pour en déduire les relations entre les coordonnées de forme dans le cas de cette symétrie. Nous reprenons exactement les notations de [15] où certaines fonctions sont désignées avec la lettre  $P$  ou  $T$  et avec deux indices numériques séparés par un espace. Les fonctions  $P$  sont les polynômes associés d'Adrien-Marie LEGENDRE et les fonctions  $T$  sont les fonctions sphériques de base ayant la symétrie recherchée.

$$T_{60}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{13}{11\pi}} \left[ \frac{11}{10} P_{60}(\cos \theta) - \frac{1}{3600} P_{65}(\cos \theta) \cos(5\phi) \right], \quad (\text{F}_2.1)$$

$$T_{100}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{1729\pi}} \left[ \frac{1729}{50} P_{100}(\cos \theta) + \frac{19}{18\,000} P_{105}(\cos \theta) \cos(5\phi) \right. \\ \left. + \frac{1}{25\,920\,000} P_{1010}(\cos \theta) \cos(10\phi) \right] \quad (\text{F}_2.2)$$

et

$$T_{120}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{595\pi}} \left[ \frac{357}{10} P_{120}(\cos \theta) - \frac{1}{7200} P_{125}(\cos \theta) \cos(5\phi) \right. \\ \left. + \frac{1}{399\,168\,000} P_{1210}(\cos \theta) \cos(10\phi) \right]. \quad (\text{F}_2.3)$$

Alors en utilisant la formule d'Abraham de MOIVRE

$$\cos(n\phi) = \frac{e^{ni\phi} + e^{-ni\phi}}{2}, \quad (\text{F}_2.4)$$

nous avons

$$T_{60}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{13}{11\pi}} \left[ \frac{11}{10} P_{60}(\cos \theta) - \frac{1}{7200} P_{65}(\cos \theta) e^{5i\phi} - \frac{1}{7200} P_{65}(\cos \theta) e^{-5i\phi} \right], \quad (\text{F}_2.5)$$

$$T_{100}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{1729\pi}} \left[ \frac{1729}{50} P_{100}(\cos \theta) + \frac{19}{36\,000} P_{105}(\cos \theta) e^{5i\phi} + \frac{19}{36\,000} P_{105}(\cos \theta) e^{-5i\phi} \right. \\ \left. + \frac{1}{51\,840\,000} P_{1010}(\cos \theta) e^{10i\phi} + \frac{1}{51\,840\,000} P_{1010}(\cos \theta) e^{-10i\phi} \right] \quad (\text{F}_2.6)$$

et

$$T_{120}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{595\pi}} \left[ \frac{357}{10} P_{120}(\cos \theta) - \frac{1}{14\,400} P_{125}(\cos \theta) e^{5i\phi} - \frac{1}{14\,400} P_{125}(\cos \theta) e^{-5i\phi} \right. \\ \left. + \frac{1}{798\,336\,000} P_{1210}(\cos \theta) e^{10i\phi} + \frac{1}{798\,336\,000} P_{1210}(\cos \theta) e^{-10i\phi} \right]. \quad (\text{F}_2.7)$$

En factorisant dans chaque expression par le facteur du polynôme associé de LEGENDRE  $P_{\lambda 0}$  et avec la propriété de ces polynômes

$$P_{\lambda\mu}(\cos \theta) = (-1)^\mu \frac{(\lambda + \mu)!}{(\lambda - \mu)!} P_{\lambda - \mu}(\cos \theta), \quad (\text{F}_2.8)$$

nous avons

$$T_{60}(\theta, \phi) = \frac{1}{10} \sqrt{\frac{143}{\pi}} \left[ P_{60}(\cos \theta) - \frac{1}{7920} P_{65}(\cos \theta) e^{5i\phi} + \frac{11!}{7920} P_{6-5}(\cos \theta) e^{-5i\phi} \right], \quad (\text{F}_2.9)$$

$$T_{100}(\theta, \phi) = \frac{1}{50} \sqrt{\frac{1729}{\pi}} \left[ P_{100}(\cos \theta) + \frac{1}{65\,520} P_{105}(\cos \theta) e^{5i\phi} - \frac{15!}{5! \times 65\,520} P_{10-5}(\cos \theta) e^{-5i\phi} \right. \\ \left. + \frac{1}{1\,792\,627\,200} P_{1010}(\cos \theta) e^{10i\phi} + \frac{20!}{1\,792\,627\,200} P_{10-10}(\cos \theta) e^{-10i\phi} \right] \quad (\text{F}_2.10)$$

et

$$T_{120}(\theta, \phi) = \frac{357}{10} \frac{1}{\sqrt{595\pi}} \left[ P_{120}(\cos \theta) - \frac{1}{514\,080} P_{125}(\cos \theta) e^{5i\phi} + \frac{17!}{7! \times 514\,080} P_{12-5}(\cos \theta) e^{-5i\phi} \right. \\ \left. + \frac{1}{28\,500\,595\,200} P_{1210}(\cos \theta) e^{10i\phi} + \frac{22!}{798\,336\,000} P_{12-10}(\cos \theta) e^{-10i\phi} \right]. \quad (\text{F}_2.11)$$

Ensuite, avec la définition des harmoniques sphériques à partir des polynômes associés de LEGENDRE, p. 47,

$$(2.1.2) \quad Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = Z_{\lambda\mu} P_{\lambda\mu}(\cos \theta) e^{i\mu\phi},$$

sachant que, p. 47,

$$(2.1.3) \quad Z_{\lambda\mu} = \sqrt{\frac{2\lambda + 1}{4\pi} \frac{(\lambda - \mu)!}{(\lambda + \mu)!}},$$

nous obtenons

$$T_{60}(\theta, \phi) = \frac{1}{10} \sqrt{\frac{143}{\pi}} \left[ \sqrt{\frac{4\pi}{13}} Y_{60}(\theta, \phi) - \frac{1}{7920} \sqrt{\frac{4\pi \times 11!}{13}} Y_{65}(\theta, \phi) + \frac{11!}{7920} \sqrt{\frac{4\pi}{13 \times 11!}} Y_{6-5}(\theta, \phi) \right], \quad (\text{F}_2.12)$$

$$\begin{aligned} T_{100}(\theta, \phi) = \frac{1}{50} \sqrt{\frac{1729}{\pi}} & \left[ \sqrt{\frac{4\pi}{21}} Y_{100}(\theta, \phi) + \frac{1}{65 \cdot 520} \sqrt{\frac{4\pi \times 15!}{21 \times 5!}} Y_{105}(\theta, \phi) \right. \\ & - \frac{15!}{5! \times 65 \cdot 520} \sqrt{\frac{4\pi \times 5!}{21 \times 15!}} Y_{10-5}(\theta, \phi) + \frac{1}{1 \, 792 \, 627 \, 200} \sqrt{\frac{4\pi \times 20!}{21}} Y_{1010}(\theta, \phi) \\ & \left. + \frac{20!}{1 \, 792 \, 627 \, 200} \sqrt{\frac{4\pi}{21 \times 20!}} Y_{10-10}(\theta, \phi) \right] \quad (\text{F}_2.13) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} T_{120}(\theta, \phi) = \frac{357}{10} \frac{1}{\sqrt{595\pi}} & \left[ \sqrt{\frac{4\pi}{25}} Y_{120}(\theta, \phi) - \frac{1}{514 \, 080} \sqrt{\frac{4\pi \times 17!}{25 \times 7!}} Y_{125}(\theta, \phi) \right. \\ & + \frac{17!}{7! \times 514 \, 080} \sqrt{\frac{4\pi \times 7!}{25 \times 17!}} Y_{12-5}(\theta, \phi) + \frac{1}{28 \, 500 \, 595 \, 200} \sqrt{\frac{4\pi \times 22!}{25 \times 2}} Y_{1210}(\theta, \phi) \\ & \left. + \frac{22!}{798 \, 336 \, 000} \sqrt{\frac{4\pi \times 2}{25 \times 22!}} Y_{12-10}(\theta, \phi) \right]. \quad (\text{F}_2.14) \end{aligned}$$

En simplifiant ces expressions, nous arrivons alors à

$$T_{60}(\theta, \phi) = \frac{\sqrt{11}}{5} \left[ Y_{60}(\theta, \phi) - \sqrt{\frac{7}{11}} \left( Y_{65}(\theta, \phi) - Y_{6-5}(\theta, \phi) \right) \right], \quad (\text{F}_2.15)$$

$$\begin{aligned} T_{100}(\theta, \phi) = \frac{1}{25} \sqrt{\frac{243}{3}} & \left[ Y_{100}(\theta, \phi) + \sqrt{\frac{33}{13}} \left( Y_{105}(\theta, \phi) - Y_{10-5}(\theta, \phi) \right) \right. \\ & \left. + \sqrt{\frac{187}{247}} \left( Y_{1010}(\theta, \phi) + Y_{10-10}(\theta, \phi) \right) \right] \quad (\text{F}_2.16) \end{aligned}$$

et

$$T_{120}(\theta, \phi) = \frac{3}{25} \sqrt{\frac{119}{5}} \left[ Y_{120}(\theta, \phi) - \frac{1}{3} \sqrt{\frac{286}{119}} (Y_{125}(\theta, \phi) - Y_{12-5}(\theta, \phi)) \right. \\ \left. + \sqrt{\frac{247}{357}} (Y_{1210}(\theta, \phi) + Y_{12-10}(\theta, \phi)) \right]. \quad (\text{F}_2.17)$$

À partir d'ici, il suffit de comparer l'expression de la sphère déformée par l'une des ces trois fonctions avec son développement sur les harmoniques sphériques ; ainsi

$$R(\theta, \phi; \alpha) = R_0 [1 + aT_{60}(\theta, \phi)] \quad (\text{F}_2.18)$$

$$= R_0 [1 + \alpha_6^0 Y_{60}(\theta, \phi) + \alpha_6^5 (Y_{65}(\theta, \phi) - Y_{6-5}(\theta, \phi))], \quad (\text{F}_2.19)$$

qui donne

$$\alpha_6^0 = a \frac{\sqrt{11}}{5} \quad (\text{F}_2.20)$$

et

$$\alpha_6^{\pm 5} = \mp \sqrt{\frac{7}{11}} \alpha_6^0. \quad (\text{F}_2.21)$$

Ensuite

$$R(\theta, \phi; \alpha) = R_0 [1 + aT_{100}(\theta, \phi)] \quad (\text{F}_2.22)$$

$$= R_0 [1 + \alpha_{10}^0 Y_{100}(\theta, \phi) + \alpha_{10}^5 (Y_{105}(\theta, \phi) - Y_{10-5}(\theta, \phi)) \\ + \alpha_{10}^{10} (Y_{1010}(\theta, \phi) - Y_{10-10}(\theta, \phi))], \quad (\text{F}_2.23)$$

qui donne

$$\alpha_{10}^0 = \frac{a}{25} \sqrt{\frac{243}{3}} \quad (\text{F}_2.24)$$

et

$$\alpha_{10}^{\pm 5} = \pm \sqrt{\frac{33}{13}} \alpha_{10}^0, \quad \alpha_{10}^{\pm 10} = \sqrt{\frac{187}{247}} \alpha_{10}^0. \quad (\text{F}_2.25)$$

Et enfin

$$R(\theta, \phi; \alpha) = R_0 [1 + aT_{120}(\theta, \phi)] \quad (\text{F}_2.26)$$

$$= R_0 [1 + \alpha_{12}^0 Y_{120}(\theta, \phi) + \alpha_{12}^5 (Y_{125}(\theta, \phi) - Y_{12-5}(\theta, \phi)) \\ + \alpha_{12}^{10} (Y_{1210}(\theta, \phi) - Y_{12-10}(\theta, \phi))], \quad (\text{F}_2.27)$$

qui donne

$$\alpha_{12}^0 = a \frac{3}{25} \sqrt{\frac{119}{5}} \quad (\text{F}_2.28)$$

et

$$\alpha_{12}^{\pm 5} = \mp \frac{1}{3} \sqrt{\frac{286}{119}} \alpha_{12}^0, \quad \alpha_{12}^{\pm 10} = \sqrt{\frac{247}{357}} \alpha_{12}^0. \quad (\text{F}_2.29)$$

Les relations (F<sub>2</sub>.21), (F<sub>2</sub>.25) et (F<sub>2</sub>.29) sont données dans le tableau 2.3 p. 71.

## Bibliographie du chapitre 2

- [10] V. A. VARSHALOVICH, A. N. MOSKALEV & V. K. KHERSONSKII, « Quantum Theory of Angular Momentum », World Scientific, Singapour New-Jersey Hong-Kong, 1988, pp. 61, 62, 132.
- [11] A. MAJ, K. MAZUREK, J. DUDEK, M. KMIĘCIK & D. ROUVEL, « Shape Evolution at High Spins and Temperature : Nuclear Jacobi and Poincaré Shape Transitions », *Int. Journal of Modern Physics E*19 (2010) 532-540.
- [12] K. MAZUREK, J. DUDEK, M. KMIĘCIK, A. MAJ, J.-P. WIELECZKO & D. ROUVEL, « Poincaré Shape Transitions in Hot Rotating Nuclei », *Acta Physica Polonica*, B42 (2011) 471-476.
- [13] K. MAZUREK, J. DUDEK, A. MAJ & D. ROUVEL, « Nuclear Jacobi and Poincaré Transitions at High Spins and Temperatures : Account of Dynamic Effects and Large-Amplitude Motion », *Phys. Rev. C*. (soumis janvier 2014).
- [14] J. DUDEK, A. GÓŹDŹ & N. SCHUNCK, « Atomic Nuclei with Tetrahedral and Octahedral Symmetries », *Acta Phys. Polon.* B34, 2003.
- [15] Y. ZHENG & P. C. DOERSCHUK, « Explicit Orthonormal Bases for Functions Exhibiting the Rotational Symmetries of a Platonic Solid », Purdue University, 1994.
- [16] K. BALASUBRAMANIAN, « Double group of the icosahedral group ( $I_h$ ) and its application to fullerenes », *Chem. Phys. Let.* 260, 476-484, 1996.
- [17] J.-L. RIVAIL, « Éléments de chimie quantique », CNRS Éditions, Paris, 1999.
- [18] M. HAMERMESH, « Group Theory and its Applications to Physical Problems », Pergamon Press, New York, 1964.
- [19] J. F. CORNWELL, « Group Theory in Physics », Academic Press, London, 1984.
- [20] J. DUDEK, D. CURIEN & D. ROUVEL, « The suggested Presence of the Tetrahedral-Symmetry in the Ground-State Configuration of the  ${}^{96}_{40}\text{Zr}_{56}$  Nucleus », *Physica Scripta* (accepté 2014).
- [21] J. DUDEK, K. MAZUREK, A. MAJ & D. ROUVEL, « Symmetry Breaking at High Temperature and Spin : Nuclear Jacobi and Poincaré Transitions », *Proceedings of the EURISOL Conference 2013, Cracow Pologne*.






« Eine neue wissenschaftliche Wahrheit pflügt sich nicht in der Weise durchzusetzen, daß ihre Gegner überzeugt werden und sich als belehrt erklären, sondern vielmehr dadurch, daß ihre Gegner allmählich aussterben und daß die heranwachsende Generation von vornherein mit der Wahrheit vertraut gemacht ist. » †  
 Max PLANCK

## Chapitre 3

# Le tenseur de masse nucléaire

 APPARIEMENT DES nucléons modifie grandement les propriétés nucléaires par rapport à la situation simple du champ moyen. Nous rappelons dans la première section comment prendre en compte cette interaction en plus du champ moyen. La deuxième section nous permet de développer l'association de l'inertie collective des protons et des neutrons, inerties qui sont donc calculables séparément. Au cours de la troisième section, l'expression du tenseur de masse est développée dans le cadre des hypothèses du champ moyen et de l'appariement monopolaire et uniforme. Enfin la quatrième section s'attache à montrer les résultats numériques sur l'inertie collective et à les interpréter.

### 3.1 Prise en compte de l'appariement

NOUS RAPPELONS l'expression du tenseur de masse que nous avons obtenue au chapitre 1 dans un cadre assez général, p. 31 :

$$(1.4.55) \quad B_{m\ell}(q; \tau) = 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_j^{\mathbb{N}^*} \frac{\aleph_{0j}(q; \tau)}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_0(q)} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0(q) \rangle \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0(q) \rangle^*,$$

et nous savons que nous devons calculer

$$\mathcal{E}_0, \quad \mathcal{E}_j, \quad \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0(q) \rangle, \quad \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0(q) \rangle^*$$

dans le cadre plus précis du champ moyen précisé au chapitre 2. Jusqu'à maintenant nous avons considéré les particules comme indépendantes mais en réalité de nombreux faits expérimentaux

---

†. « Une vérité nouvelle en science n'arrive jamais à triompher en convainquant les adversaires et en les amenant à voir la lumière, mais plutôt parce que finalement ces adversaires meurent et qu'une nouvelle génération grandit, à qui cette vérité est familière. »

montrent qu'il s'agit d'une approximation très grossière. En particulier, le fait systématique que les noyaux pair-pair présentent un état de spin nul dans leur état fondamental suggère une interaction conduisant à l'appariement préférentiel des nucléons de spin opposé, ou ce qui revient au même, temporellement conjugués. Nous effectuons à partir d'ici un changement de numérotation des états afin de mieux refléter leur conjugaison temporelle. La conjugaison temporelle, nous le savons bien, consiste à appliquer l'opérateur de renversement  $\hat{\mathcal{T}}$  du temps et, du fait de l'invariance des lois physiques microscopiques (hormis l'interaction faible) par rapport au renversement du temps, nous pouvons dire que, si nous avons un état solution  $|\psi_\mu\rangle$ , alors l'état temporellement conjugué  $\hat{\mathcal{T}}|\psi_\mu\rangle$  est aussi solution avec la même valeur propre. Nous utilisons un changement de signe dans la numérotation de l'état pour signifier la conjugaison temporelle, ainsi

$$\hat{\mathcal{T}}|\psi_\mu\rangle = \text{sgn } \mu |\psi_{-\mu}\rangle. \quad (3.1.1)$$

Dans ce nouveau contexte, nous ajoutons une interaction d'appariement dans le hamiltonien à  $N$  particules en plus des champs moyens. Dès lors les états de particules indépendantes deviennent partiellement occupés et partiellement inoccupés. Pour les états  $|\psi_\mu\rangle$  et  $|\psi_{-\mu}\rangle$ , la probabilité d'occupation est  $v_\mu$  et celle de non-occupation est  $u_\mu$  avec

$$u_\mu^2 + v_\mu^2 = 1 \quad (3.1.2)$$

et

$$u_{-\mu} = u_\mu, \quad v_{-\mu} = v_\mu. \quad (3.1.3)$$

En l'absence d'appariement, un état individuel est toujours exprimé par

$$|\psi_\mu\rangle = \hat{c}_\mu^+ |\emptyset\rangle \quad \text{avec } \mu \in \mathbb{Z}^*, \quad (3.1.4)$$

une paire d'états temporellement conjugués l'est par

$$|\phi_\mu\rangle = \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+ |\emptyset\rangle \quad \text{avec } \mu \in \mathbb{N}^*, \quad (3.1.5)$$

nous permettant d'écrire l'état fondamental comme

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{\mu=1}^{\frac{N}{2}} \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+ |\emptyset\rangle. \quad (3.1.6)$$

En présence de l'appariement, nous ne considérons plus les états individuels antérieurs que comme une base. Les états précédents de paires conjuguées temporellement sont remplacés par

$$|\phi_\mu\rangle = u_\mu |\emptyset\rangle + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+ |\emptyset\rangle \quad \text{avec } \mu \in \mathbb{N}^*. \quad (3.1.7)$$

**PROPOSITION 9 :**

En présence de l'appariement, nous suggérons que la forme de l'état fondamental soit :

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{\mu}^{\mathbb{N}^*} (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) |\emptyset\rangle. \quad (3.1.8)$$



Nous pouvons réécrire cet état fondamental afin de montrer qu'il correspond à une superposition d'états avec des nombres de particules différents :

$$|\Psi_0\rangle = \left( \prod_{\mu}^{\mathbb{N}^*} u_{\mu} \right) \prod_{\mu}^{\mathbb{N}^*} \left( 1 + \frac{v_{\mu}}{u_{\mu}} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \right) |\emptyset\rangle \quad (3.1.9)$$

$$= \left( \prod_{\mu}^{\mathbb{N}^*} u_{\mu} \right) \left[ |\emptyset\rangle + \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} \frac{v_{\mu}}{u_{\mu}} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ |\emptyset\rangle + \left( \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} \frac{v_{\mu}}{u_{\mu}} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \right)^2 |\emptyset\rangle + \dots \right] \quad (3.1.10)$$

$$= \left( \prod_{\mu}^{\mathbb{N}^*} u_{\mu} \right) \sum_{\nu}^{\mathbb{N}} \left( \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} \frac{v_{\mu}}{u_{\mu}} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \right)^{\nu} |\emptyset\rangle. \quad (3.1.11)$$

Tout l'avantage des particules indépendantes est perdu, même avec une interaction aussi simple que l'appariement uniforme et monopolaire des états temporellement conjugués. Mais la transformation de Nikolaï BOGOLIUBOV permet de restaurer cet avantage au prix de considérer des quasiparticules à la place de particules. Les quasiparticules sont définies à partir de leurs opérateurs de création  $\hat{a}_{\mu}^+$  et d'annihilation  $\hat{a}_{\mu}$ .

**THÉORÈME 13 :**

Dans le cadre de la théorie BCS, la transformation de BOGOLIUBOV est (voir [22] bibliographie p. 145)

$$\begin{cases} \hat{a}_{\mu}^+ = u_{\mu} \hat{c}_{\mu}^+ - \text{sgn } \mu v_{\mu} \hat{c}_{-\mu} \\ \hat{a}_{\mu} = u_{\mu} \hat{c}_{\mu} - \text{sgn } \mu v_{\mu} \hat{c}_{-\mu}^+ \end{cases} \quad (3.1.12)$$

et inversement

$$\begin{cases} \hat{c}_{\mu}^+ = u_{\mu} \hat{a}_{\mu}^+ + \text{sgn } \mu v_{\mu} \hat{a}_{-\mu} \\ \hat{c}_{\mu} = u_{\mu} \hat{a}_{\mu} + \text{sgn } \mu v_{\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \end{cases} \quad (3.1.13)$$

De par leur constitution, l'état fondamental BCS et les quasiparticules impliquent des états contenant un nombre indéfini de particules. Pour rétablir le nombre exact de particules (protons ou bien neutrons) dans le noyau, il faut ajouter au hamiltonien à  $N$  particules, en plus du terme d'appariement, une contrainte conformément à la méthode des multiplicateurs de LAGRANGE. Cette contrainte utilise l'opérateur nombre de particules qui rétablit en moyenne le nombre de protons ou bien le nombre de neutrons.

**THÉORÈME 14 :**

Dans le cadre de la théorie BCS, le hamiltonien à  $N$  particules est écrit

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \hat{H}_P - \lambda \hat{N}, \quad (3.1.14)$$

où  $\hat{H}_P$  est le hamiltonien d'appariement,  $\lambda$  l'énergie de FERMÍ et  $\hat{N}$  l'opérateur nombre de particules. Dans la notation de seconde quantification

$$\hat{H} = \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{Z}^*} \langle \psi_{\mu} | \hat{H} | \psi_{\nu} \rangle \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\nu} = \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} e_{\mu} (\hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\mu} + \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}), \quad (3.1.15)$$

$$\hat{H}_P = -G \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{N}^*} \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\nu} \hat{c}_\nu, \quad (3.1.16)$$

$$\hat{N} = \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} (\hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\mu + \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}), \quad (3.1.17)$$

d'où

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} (e_\mu - \lambda) (\hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\mu + \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}) - G \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{N}^*} \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\nu} \hat{c}_\nu. \quad (3.1.18)$$

Nous ne pouvons pas réexposer plus avant la théorie BCS car ce n'est pas le lieu pour cela, mais nous devons encore rappeler quelques résultats de cette théorie qui nous sont utiles.

**DÉFINITION 5 :**

L'énergie d'appariement (en anglais *pairing gap*) est

$$\Delta = G \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} u_\mu v_\mu. \quad (3.1.19)$$

**DÉFINITION 6 :**

L'énergie d'une quasiparticule dans l'état  $\mu$  est

$$E_\mu = \sqrt{(e_\mu - \lambda)^2 + \Delta^2}. \quad (3.1.20)$$

**THÉORÈME 15 :**

La probabilité de non-occupation de l'état  $\mu$  est

$$u_\mu = \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{e_\mu - \lambda}{2E_\mu}} \quad (3.1.21)$$

et la probabilité d'occupation de l'état  $\mu$  est

$$v_\mu = \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{e_\mu - \lambda}{2E_\mu}}. \quad (3.1.22)$$

L'état fondamental est considéré comme un vide de quasiparticules et les états excités à une particule et un trou sont remplacés par des états à un nombre pair de quasiparticules.

**PROPOSITION 10 :**

Nous considérons que les seuls états excités significatifs sont les états à deux quasiparticules

$$|\Psi_{\iota, \kappa}\rangle = \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ |\Psi_0\rangle. \quad (3.1.23)$$

Nous avons besoin de connaître l'énergie de l'état fondamental et l'énergie d'un état excité à deux quasiparticules

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_0 = \langle \Psi_0 | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_0 \rangle &= \sum_{\mu}^{\mathbf{N}^*} (e_{\mu} - \lambda) \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\mu} | \Psi_0 \rangle + \sum_{\mu}^{\mathbf{N}^*} (e_{\mu} - \lambda) \langle \Psi_0 | \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\mu} | \Psi_0 \rangle \\ &\quad - G \sum_{\mu, \nu}^{\mathbf{N}^*} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\nu} \hat{c}_{\nu} | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (3.1.24)$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\iota, \kappa} = \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_{\iota, \kappa} \rangle &= \sum_{\mu}^{\mathbf{N}^*} (e_{\mu} - \lambda) [\langle \Psi_0 | \hat{a}_{\kappa} \hat{a}_{\iota} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\mu} \hat{a}_{\iota}^+ \hat{a}_{\kappa}^+ | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | \hat{a}_{\kappa} \hat{a}_{\iota} \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\mu} \hat{a}_{\iota}^+ \hat{a}_{\kappa}^+ | \Psi_0 \rangle] \\ &\quad - G \sum_{\mu, \nu}^{\mathbf{N}^*} \langle \Psi_0 | \hat{a}_{\kappa} \hat{a}_{\iota} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\nu} \hat{c}_{\nu} \hat{a}_{\iota}^+ \hat{a}_{\kappa}^+ | \Psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.1.25)$$

### THÉORÈME 16 :

L'énergie de l'état fondamental est <sup>1</sup>

$$\mathcal{E}_0 = 2 \sum_{\mu}^{\mathbf{N}^*} (e_{\mu} - \lambda) v_{\mu}^2 - G \sum_{\mu}^{\mathbf{N}^*} v_{\mu}^4 - \frac{\Delta^2}{G} \quad (3.1.26)$$

et l'énergie d'un état excité à deux quasiparticules est

$$\mathcal{E}_{\iota, \kappa} = \mathcal{E}_0 + E_{\iota} + E_{\kappa} - G(u_{\iota} v_{\iota} + u_{\kappa} v_{\kappa})^2 + G(v_{\iota}^4 + v_{\kappa}^4) - G\delta_{\kappa-\iota}(u_{\iota}^4 + v_{\iota}^4). \quad (3.1.27)$$

~~~~~

Nous avons ainsi montré comment résoudre théoriquement le mouvement d'un nucléon pris dans un champ moyen auquel s'ajoute un appariement uniforme et monopolaire. La résolution concrète reste numérique et consiste à calculer les éléments de matrice du hamiltonien de champ moyen dans une base d'oscillateur harmonique déformé à trois dimensions, puis à diagonaliser la matrice obtenue. Nous utilisons aussi la méthode de STRUTINSKY pour corriger la partie macroscopique. Tout cela est réalisé par le programme `WS_ODD` et correspond à la première étape dans la résolution complète lors de l'utilisation de l'approximation adiabatique. En effet, toute la résolution du champ moyen est obtenue avec des coordonnées de forme constantes. Toutefois cette résolution est effectuée non pas pour une forme unique mais sur une partie de l'espace collectif point par point avec un pas réglable. Il reste maintenant à réaliser la seconde étape de la résolution, en traitant le mouvement collectif. Pour cela le programme `WS_ODD` doit calculer l'énergie du noyau dans l'espace collectif et le tenseur de masse, informations qui sont ensuite transmises au programme `SE_COL` qui effectue la résolution numérique du mouvement collectif. Nous devons maintenant montrer comment le tenseur de masse se réalise dans le cadre du champ moyen que nous utilisons après avoir recombinaé les protons et les neutrons.

1. Voir l'annexe A3 p. 131.

3.2 Recombinaison des protons et des neutrons

DANS L'EXPRESSION du tenseur de masse, pour le moment assez générale puisque le champ moyen n'y apparaît pas encore, p. 31,

$$(1.4.55) \quad B_{m\ell}(q; \tau) = 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_j^{\mathbb{N}^*} \frac{\mathcal{N}_{0j}(q; \tau)}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_0(q)} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0(q) \rangle \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0(q) \rangle^*,$$

les états $|\Psi_0\rangle$ et $|\Psi_j\rangle$ sont des états du noyau complet avec les protons et les neutrons, et non exclusivement des protons ou bien des neutrons. Or, jusqu'ici nous avons séparé le traitement des deux types de nucléons. Pour les recombinaison nous écrivons

$$|\Psi_0\rangle = |\Psi_{0p}\rangle \otimes |\Psi_{0n}\rangle \quad \text{et} \quad \mathcal{E}_0 = \mathcal{E}_{0p} + \mathcal{E}_{0n} \quad (3.2.1)$$

pour l'état fondamental et pour les états excités

$$|\Psi_j\rangle = |\Psi_{jp}\rangle \otimes |\Psi_{jn}\rangle \quad \text{et} \quad \mathcal{E}_j = \mathcal{E}_{jp} + \mathcal{E}_{jn}. \quad (3.2.2)$$

Alors

$$\langle \Psi_j | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_{jp} | \otimes \langle \Psi_{jn} | \frac{\partial}{\partial q^n} (|\Psi_{0p}\rangle \otimes |\Psi_{0n}\rangle) \quad (3.2.3)$$

$$= \langle \Psi_{jp} | \otimes \langle \Psi_{jn} | \frac{\partial}{\partial q^n} (|\Psi_{0p}\rangle) \otimes |\Psi_{0n}\rangle + \langle \Psi_{jp} | \otimes \langle \Psi_{jn} | \frac{\partial}{\partial q^n} (|\Psi_{0n}\rangle) \otimes |\Psi_{0p}\rangle \quad (3.2.4)$$

$$= \langle \Psi_{jp} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_{0p} \rangle \langle \Psi_{jn} | \Psi_{0n} \rangle + \langle \Psi_{jn} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_{0n} \rangle \langle \Psi_{jp} | \Psi_{0p} \rangle \quad (3.2.5)$$

et de la même manière

$$\langle \Psi_j | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* = \langle \Psi_{jp} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_{0p} \rangle^* \langle \Psi_{jn} | \Psi_{0n} \rangle^* + \langle \Psi_{jn} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_{0n} \rangle^* \langle \Psi_{jp} | \Psi_{0p} \rangle^*. \quad (3.2.6)$$

Nous trouvons alors que

$$\begin{aligned} \langle \Psi_j | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_j | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* = & \\ & \langle \Psi_{jp} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_{0p} \rangle \langle \Psi_{jp} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_{0p} \rangle^* | \langle \Psi_{jn} | \Psi_{0n} \rangle |^2 \\ & + \langle \Psi_{jp} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_{0p} \rangle \langle \Psi_{jn} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_{0n} \rangle^* \langle \Psi_{jn} | \Psi_{0n} \rangle \langle \Psi_{jp} | \Psi_{0p} \rangle^* \\ & + \langle \Psi_{jn} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_{0n} \rangle \langle \Psi_{jp} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_{0p} \rangle^* \langle \Psi_{jp} | \Psi_{0p} \rangle \langle \Psi_{jn} | \Psi_{0n} \rangle^* \\ & + \langle \Psi_{jn} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_{0n} \rangle \langle \Psi_{jn} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_{0n} \rangle^* | \langle \Psi_{jp} | \Psi_{0p} \rangle |^2 \quad (3.2.7) \end{aligned}$$

et, puisque

$$\langle \Psi_{jn} | \Psi_{0n} \rangle = \delta_{jn0n}, \quad \langle \Psi_{jp} | \Psi_{0p} \rangle = \delta_{jp0p} \quad (3.2.8)$$

et que les deux indices jp et jn ne peuvent pas être nuls simultanément, nous découpons la somme présente dans le tenseur de masse en deux termes

$$\begin{aligned}
B_{m\ell}(q; \tau) = & \\
& 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{jp}^{\mathbb{N}^*} \frac{\aleph_{0j}(q; \tau)}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_0(q)} \langle \Psi_{jp}(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_{0p}(q) \rangle \langle \Psi_{jp}(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_{0p}(q) \rangle^* | \langle \Psi_{0n}(q) | \Psi_{0n}(q) \rangle|^2 \\
& + \\
& 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{jn}^{\mathbb{N}^*} \frac{\aleph_{0j}(q; \tau)}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_0(q)} \langle \Psi_{jn}(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_{0n}(q) \rangle \langle \Psi_{jn}(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_{0n}(q) \rangle^* | \langle \Psi_{0p}(q) | \Psi_{0p}(q) \rangle|^2.
\end{aligned} \tag{3.2.9}$$

Nous pouvons évidemment simplifier ce résultat car les états excités où les indices jp et jn sont non nuls simultanément sont aussi exclus ; par conséquent

$$|\Psi_j\rangle = |\Psi_{jn}\rangle \otimes |\Psi_{0p}\rangle \quad \text{ou bien} \quad |\Psi_{jp}\rangle \otimes |\Psi_{0n}\rangle \tag{3.2.10}$$

et

$$\mathcal{E}_j = \mathcal{E}_{jn} + \mathcal{E}_{0p} \quad \text{ou bien} \quad \mathcal{E}_{jp} + \mathcal{E}_{0n} \tag{3.2.11}$$

donc

$$\mathcal{E}_j - \mathcal{E}_0 = \mathcal{E}_{jn} - \mathcal{E}_{0n} \quad \text{ou bien} \quad \mathcal{E}_{jp} - \mathcal{E}_{0p} \tag{3.2.12}$$

et

$$\aleph_{0j} = \aleph_{0jn} \quad \text{ou bien} \quad \aleph_{0jp}. \tag{3.2.13}$$

Finalement les deux types de nucléons contribuent séparément au tenseur de masse à travers les états excités d'une seule espèce exclusivement :

$$\begin{aligned}
B_{m\ell}(q; \tau) = & 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{jp}^{\mathbb{N}^*} \frac{\aleph_{0jp}(q; \tau)}{\mathcal{E}_{jp}(q) - \mathcal{E}_{0p}(q)} \langle \Psi_{jp}(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_{0p}(q) \rangle \langle \Psi_{jp}(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_{0p}(q) \rangle^* \\
& + 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{jn}^{\mathbb{N}^*} \frac{\aleph_{0jn}(q; \tau)}{\mathcal{E}_{jn}(q) - \mathcal{E}_{0n}(q)} \langle \Psi_{jn}(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_{0n}(q) \rangle \langle \Psi_{jn}(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_{0n}(q) \rangle^*.
\end{aligned} \tag{3.2.14}$$

Pour la suite, nous ne traitons donc qu'une seule espèce de nucléons à la fois et nous simplifions à nouveau la notation en omettant d'écrire s'il s'agit des protons ou des neutrons.

3.3 Réalisation du tenseur de masse dans le cadre du champ moyen et de l'appariement monopolaire et uniforme

LE CALCUL que nous allons développer maintenant est assez long. Dans un souci de clarté, nous allons préparer le calcul en introduisant certaines notations et relations utiles. Puis nous découpons le calcul en deux grandes étapes avant de rassembler le tout dans le résultat final.

Préparation du calcul

Nous savons que pour nous

$$|\Psi_0(q)\rangle = \prod_{\mu}^{\mathbb{N}^*} [u_{\mu}(q) + v_{\mu}(q)\hat{c}_{\mu}^{+}(q)\hat{c}_{-\mu}^{+}(q)] |\emptyset\rangle \quad (3.3.1)$$

et nous introduisons l'état fondamental bloqué en ν

$$|\Psi_{0/\nu}(q)\rangle = \prod_{\substack{\mu \\ \mu \neq |\nu|}}^{\mathbb{N}^*} [u_{\mu}(q) + v_{\mu}(q)\hat{c}_{\mu}^{+}(q)\hat{c}_{-\mu}^{+}(q)] |\emptyset\rangle. \quad (3.3.2)$$

Les états excités à deux quasiparticules sont

$$|\Psi_j(q)\rangle = |\Psi_{\iota,\kappa}(q)\rangle = \hat{a}_{\iota}^{+}(q)\hat{a}_{\kappa}^{+}(q) |\Psi_0(q)\rangle \quad (3.3.3)$$

et donc

$$\langle\Psi_j(q)| = \langle\Psi_{\iota,\kappa}(q)| = \langle\Psi_0(q)| \hat{a}_{\kappa}(q)\hat{a}_{\iota}(q) \quad (3.3.4)$$

avec nécessairement $\iota \neq \kappa$ du fait que les quasiparticules sont des fermions. Mais par ailleurs nous avons aussi écrit

$$|\Psi_0(q)\rangle = \left(\prod_{\mu}^{\mathbb{N}^*} u_{\mu}(q) \right) \sum_{\nu}^{\mathbb{N}} \left(\sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} \frac{v_{\mu}(q)}{u_{\mu}(q)} \hat{c}_{\mu}^{+}(q)\hat{c}_{-\mu}^{+}(q) \right)^{\nu} |\emptyset\rangle. \quad (3.3.5)$$

Alors nous posons

$$\mathcal{N}(q) = \prod_{\mu}^{\mathbb{N}^*} u_{\mu}(q) \quad (3.3.6)$$

et

$$\hat{\mathcal{O}}(q) = \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} \frac{v_{\mu}(q)}{u_{\mu}(q)} \hat{c}_{\mu}^{+}(q)\hat{c}_{-\mu}^{+}(q), \quad (3.3.7)$$

ce qui nous permet d'avoir une écriture plus compacte :

$$|\Psi_0(q)\rangle = \mathcal{N}(q) \sum_{\nu}^{\mathbb{N}} \hat{\mathcal{O}}^{\nu}(q) |\emptyset\rangle, \quad (3.3.8)$$

et de voir ainsi l'action de l'opérateur $\frac{\partial}{\partial q^n}$ sur cet état fondamental. En effet,

$$\frac{\partial}{\partial q^n} |\Psi_0(q)\rangle = \frac{\partial \mathcal{N}}{\partial q^n}(q) \sum_{\nu}^{\mathbb{N}} \hat{\mathcal{O}}^{\nu}(q) |\emptyset\rangle + \mathcal{N}(q) \sum_{\nu}^{\mathbb{N}} \frac{\partial \hat{\mathcal{O}}^{\nu}}{\partial q^n}(q) |\emptyset\rangle \quad (3.3.9)$$

et

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{O}}^{\nu}}{\partial q^n}(q) = \sum_{p=0}^{\nu-1} \hat{\mathcal{O}}^p(q) \frac{\partial \hat{\mathcal{O}}}{\partial q^n}(q) \hat{\mathcal{O}}^{\nu-1-p}(q) \quad (3.3.10)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\mathcal{O}}}{\partial q^n}(q) &= \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} \frac{1}{u_{\mu}^2(q)} \left(\frac{\partial v_{\mu}}{\partial q^n}(q) u_{\mu}(q) - v_{\mu}(q) \frac{\partial u_{\mu}}{\partial q^n}(q) \right) \hat{c}_{\mu}^{+}(q) \hat{c}_{-\mu}^{+}(q) \\ &\quad + \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} \frac{v_{\mu}(q)}{u_{\mu}(q)} \left(\frac{\partial \hat{c}_{\mu}^{+}}{\partial q^n}(q) \hat{c}_{-\mu}^{+}(q) - \hat{c}_{\mu}^{+}(q) \frac{\partial \hat{c}_{-\mu}^{+}}{\partial q^n}(q) \right) \end{aligned} \quad (3.3.11)$$

a priori

$$\left[\hat{\mathcal{O}}, \frac{\partial \hat{\mathcal{O}}}{\partial q^n} \right] \neq 0, \quad (3.3.12)$$

ce qui ne permet pas de simplifier plus. Puis

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q^n} |\Psi_0(q)\rangle &= \frac{\partial \mathcal{N}}{\partial q^n}(q) \sum_{\nu}^{\mathbb{N}} \hat{\mathcal{O}}^{\nu}(q) |\emptyset\rangle \\ &\quad + \mathcal{N}(q) \sum_{\nu}^{\mathbb{N}} \sum_{p=0}^{\nu-1} \hat{\mathcal{O}}^p(q) \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} \frac{1}{u_{\mu}^2(q)} \left(\frac{\partial v_{\mu}}{\partial q^n}(q) u_{\mu}(q) - v_{\mu}(q) \frac{\partial u_{\mu}}{\partial q^n}(q) \right) \hat{c}_{\mu}^{+}(q) \hat{c}_{-\mu}^{+}(q) \hat{\mathcal{O}}^{\nu-1-p}(q) |\emptyset\rangle \\ &\quad + \mathcal{N}(q) \sum_{\nu}^{\mathbb{N}} \sum_{p=0}^{\nu-1} \hat{\mathcal{O}}^p(q) \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} \frac{v_{\mu}(q)}{u_{\mu}(q)} \left(\frac{\partial \hat{c}_{\mu}^{+}}{\partial q^n}(q) \hat{c}_{-\mu}^{+}(q) - \hat{c}_{\mu}^{+}(q) \frac{\partial \hat{c}_{-\mu}^{+}}{\partial q^n}(q) \right) \hat{\mathcal{O}}^{\nu-1-p}(q) |\emptyset\rangle, \end{aligned} \quad (3.3.13)$$

dont les deux premiers termes ne contiennent aucune dérivée des opérateurs de création et le troisième les englobe toutes. Il est possible de rétablir une telle séparation à partir de la forme originale de l'état fondamental en l'écrivant schématiquement

$$|\Psi_0(q)\rangle = \sum_k^{\mathbb{N}} f_k(q) |\Phi_k(q)\rangle, \quad (3.3.14)$$

où $f_k(q)$ ne contient aucun opérateur de création et $|\Phi_k(q)\rangle$ les englobe.

Ainsi, à partir de l'équation (3.1.10) p. 107 nous identifions les premiers termes

$$f_0(q) = \mathcal{N}(q), \quad |\Phi_0(q)\rangle = |\emptyset\rangle, \quad (3.3.15)$$

$$f_1(q) = \mathcal{N}(q) \frac{v_1(q)}{u_1(q)}, \quad |\Phi_1(q)\rangle = \hat{c}_1^{+}(q) \hat{c}_{-1}^{+}(q) |\emptyset\rangle, \quad (3.3.16)$$

$$f_2(q) = \mathcal{N}(q) \frac{v_2(q)}{u_2(q)}, \quad |\Phi_2(q)\rangle = \hat{c}_2^{+}(q) \hat{c}_{-2}^{+}(q) |\emptyset\rangle, \quad (3.3.17)$$

⋮

La dérivée de l'état fondamental est donc

$$\frac{\partial}{\partial q^n} |\Psi_0(q)\rangle = \sum_k^{\mathbb{N}} \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) |\Phi_k(q)\rangle + \sum_k^{\mathbb{N}} f_k(q) \frac{\partial}{\partial q^n} |\Phi_k(q)\rangle, \quad (3.3.18)$$

où le premier terme contient l'action de l'opérateur $\frac{\partial}{\partial q^n}$ sur tout sauf les opérateurs de création et le second englobe toutes les dérivées des opérateurs de création. Désormais nous soulageons la notation en omettant la dépendance en q puisque nous savons qu'elle intervient dans chaque terme et chaque facteur. Nous reprenons donc l'expression originale de l'état fondamental donnée dans la proposition 9 p. 106

$$(3.1.8) \quad |\Psi_0\rangle = \prod_{\mu}^{\mathbb{N}^*} (u_{\mu} + v_{\mu} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+) |\emptyset\rangle,$$

et nous la dérivons par rapport à q^n . Nous dérivons d'abord, pour un premier terme, en considérant que les opérateurs de création sont constants. Ensuite, pour un second terme, en considérant que les coefficients u_{μ} et v_{μ} sont constants et en utilisant la notation de seconde quantification pour représenter la dérivation des opérateurs de création. Cela nous donne

$$\frac{\partial}{\partial q^n} |\Psi_0(q)\rangle = \sum_{\nu}^{\mathbb{N}^*} \prod_{\substack{\mu \\ \mu \neq \nu}}^{\mathbb{N}^*} (u_{\mu} + v_{\mu} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+) \left(\frac{\partial u_{\nu}}{\partial q^n} + \frac{\partial v_{\nu}}{\partial q^n} \hat{c}_{\nu}^+ \hat{c}_{-\nu}^+ \right) |\emptyset\rangle + \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{Z}^*} \langle \psi_{\mu} | \frac{\partial}{\partial q^n} |\psi_{\nu}\rangle \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\nu} |\Psi_0\rangle, \quad (3.3.19)$$

ou encore, en utilisant l'état fondamental bloqué en ν introduit dans l'équation (3.3.2) p. 112,

$$\frac{\partial}{\partial q^n} |\Psi_0(q)\rangle = \sum_{\nu}^{\mathbb{N}^*} \left(\frac{\partial u_{\nu}}{\partial q^n} + \frac{\partial v_{\nu}}{\partial q^n} \hat{c}_{\nu}^+ \hat{c}_{-\nu}^+ \right) |\Psi_{0/\nu}\rangle + \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{Z}^*} \langle \psi_{\mu} | \frac{\partial}{\partial q^n} |\psi_{\nu}\rangle \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\nu} |\Psi_0\rangle. \quad (3.3.20)$$

Nous posons donc comme un simple jeu d'écriture

$$\sum_k^{\mathbb{N}} \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) |\Phi_k(q)\rangle = \sum_{\nu}^{\mathbb{N}^*} \left(\frac{\partial u_{\nu}}{\partial q^n} + \frac{\partial v_{\nu}}{\partial q^n} \hat{c}_{\nu}^+ \hat{c}_{-\nu}^+ \right) |\Psi_{0/\nu}\rangle \quad (3.3.21)$$

et

$$\sum_k^{\mathbb{N}} f_k(q) \frac{\partial}{\partial q^n} |\Phi_k(q)\rangle = \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{Z}^*} \langle \psi_{\mu} | \frac{\partial}{\partial q^n} |\psi_{\nu}\rangle \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\nu} |\Psi_0\rangle. \quad (3.3.22)$$

Nous allons calculer séparément

$$\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) |\Phi_k(q)\rangle \quad \text{et} \quad \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}^*} f_k(q) \frac{\partial}{\partial q^n} |\Phi_k(q)\rangle.$$

Calcul de $\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) |\Phi_k(q)\rangle$

Pour effectuer ce calcul nous avons besoin de quelques propriétés des quasiparticules.

THÉORÈME 17 :

L'état fondamental est le vide de quasiparticules :²

$$\hat{a}_{\iota} |\Psi_0\rangle = 0 \quad (3.3.23)$$

2. Voir l'annexe B₃ p. 135.

$$\hat{a}_\iota |\Psi_{0/\nu}\rangle = 0 \quad \text{si} \quad |\iota| \neq |\nu|. \quad (3.3.24)$$

LEMME 9 :

Des relations de commutation utiles :³

$$\hat{a}_\iota (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) = (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) \hat{a}_\iota + u_\iota v_\mu (\delta_{\mu\iota} \hat{c}_{-\mu}^+ - \delta_{-\mu\iota} \hat{c}_\mu^+), \quad (3.3.25)$$

$$\hat{a}_\iota \left(\frac{\partial u_\nu}{\partial q^n} + \frac{\partial v_\nu}{\partial q^n} \hat{c}_\nu^+ \hat{c}_{-\nu}^+ \right) = \left(\frac{\partial u_\nu}{\partial q^n} + \frac{\partial v_\nu}{\partial q^n} \hat{c}_\nu^+ \hat{c}_{-\nu}^+ \right) \hat{a}_\iota + u_\iota \frac{\partial v_\nu}{\partial q^n} (\delta_{\nu\iota} \hat{c}_{-\nu}^+ - \delta_{-\nu\iota} \hat{c}_\nu^+). \quad (3.3.26)$$

En utilisant l'expression de l'état excité donnée par l'équation (3.1.23) de la proposition 10 p. 108, nous avons

$$\langle \Psi_{\iota,\kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) |\Phi_k(q)\rangle = \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \sum_\nu^{\mathbb{N}^*} \left(\frac{\partial u_\nu}{\partial q^n} + \frac{\partial v_\nu}{\partial q^n} \hat{c}_\nu^+ \hat{c}_{-\nu}^+ \right) |\Psi_{0/\nu}\rangle \quad (3.3.27)$$

$$= \sum_\nu^{\mathbb{N}^*} \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \left(\frac{\partial u_\nu}{\partial q^n} + \frac{\partial v_\nu}{\partial q^n} \hat{c}_\nu^+ \hat{c}_{-\nu}^+ \right) |\Psi_{0/\nu}\rangle, \quad (3.3.28)$$

et avec le théorème 17 p. 114, nous comprenons que si $\nu \neq |\iota|$ alors les termes sont nuls, d'où

$$\langle \Psi_{\iota,\kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) |\Phi_k(q)\rangle = \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \left(\frac{\partial u_\iota}{\partial q^n} + \frac{\partial v_\iota}{\partial q^n} \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \right) |\Psi_{0/|\iota|}\rangle. \quad (3.3.29)$$

Mais nous pouvons jouer sur la permutation des deux quasiparticules avec la relation de commutation

$$\hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota = -\hat{a}_\iota \hat{a}_\kappa; \quad (3.3.30)$$

alors si $\kappa \neq -\iota$, en utilisant le lemme 9 et le théorème 17 p. 114,

$$\langle \Psi_{\iota,\kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) |\Phi_k(q)\rangle = \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \left(\frac{\partial u_\iota}{\partial q^n} + \frac{\partial v_\iota}{\partial q^n} \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \right) |\Psi_{0/|\iota|}\rangle \quad (3.3.31)$$

$$= -\langle \Psi_0 | \hat{a}_\iota \hat{a}_\kappa \left(\frac{\partial u_\iota}{\partial q^n} + \frac{\partial v_\iota}{\partial q^n} \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \right) |\Psi_{0/|\iota|}\rangle \quad (3.3.32)$$

$$= -\langle \Psi_0 | \hat{a}_\iota \left(\frac{\partial u_\iota}{\partial q^n} + \frac{\partial v_\iota}{\partial q^n} \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \right) \hat{a}_\kappa |\Psi_{0/|\iota|}\rangle \quad (3.3.33)$$

$$= 0, \quad (3.3.34)$$

et nous en déduisons qu'il faut nécessairement que

$$\kappa = -\iota, \quad (3.3.35)$$

3. Voir l'annexe B₃ p. 135.

d'où

$$\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \sum_k^N \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) | \Phi_k(q) \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{a}_{-\iota} \hat{a}_{\iota} \left(\frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^n} + \frac{\partial v_{\iota}}{\partial q^n} \hat{c}_{|\iota}^+ \hat{c}_{-|\iota} \right) | \Psi_{0/|\iota} \rangle \delta_{-\iota \kappa}. \quad (3.3.36)$$

Dans cette égalité, nous remplaçons les opérateurs d'annihilation de quasiparticules par leur expression à partir des opérateurs sur les particules et, après le développement ⁴, nous arrivons à

$$\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \sum_k^N \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) | \Phi_k(q) \rangle = \text{sgn } \iota \left(\frac{\partial v_{\iota}}{\partial q^n} u_{\iota} - \frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^n} v_{\iota} \right) \delta_{-\iota \kappa}. \quad (3.3.37)$$

Comme nous connaissons une expression des coefficients u_{ι} et v_{ι} , nous pouvons encore transformer cette expression. Tout d'abord avec

$$u_{\iota}^2 + v_{\iota}^2 = 1, \quad (3.3.38)$$

nous obtenons

$$u_{\iota} \frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^n} + v_{\iota} \frac{\partial v_{\iota}}{\partial q^n} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{\partial v_{\iota}}{\partial q^n} = -\frac{u_{\iota}}{v_{\iota}} \frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^n}. \quad (3.3.39)$$

Alors

$$\frac{\partial v_{\iota}}{\partial q^n} u_{\iota} - \frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^n} v_{\iota} = -\left(\frac{u_{\iota}^2}{v_{\iota}} + v_{\iota} \right) \frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^n} = \left(\frac{u_{\iota}}{v_{\iota}} + \frac{v_{\iota}}{u_{\iota}} \right) u_{\iota} \frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^n}. \quad (3.3.40)$$

Or,

$$\frac{\partial u_{\iota}^2}{\partial q^n} = 2u_{\iota} \frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^n}, \quad (3.3.41)$$

donc

$$\frac{\partial v_{\iota}}{\partial q^n} u_{\iota} - \frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^n} v_{\iota} = -\frac{u_{\iota}^2 + v_{\iota}^2}{u_{\iota} v_{\iota}} \times \frac{1}{2} \frac{\partial u_{\iota}^2}{\partial q^n} \quad (3.3.42)$$

et subséquemment

$$\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \sum_k^N \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) | \Phi_k(q) \rangle = -\text{sgn } \iota \frac{\delta_{-\iota \kappa}}{2u_{\iota} v_{\iota}} \frac{\partial u_{\iota}^2}{\partial q^n}. \quad (3.3.43)$$

Ensuite avec

$$u_{\iota} v_{\iota} = \frac{\Delta}{2E_{\iota}}, \quad u_{\iota}^2 = \frac{1}{2} + \frac{e_{\iota} - \lambda}{2E_{\iota}}, \quad E_{\iota} = \sqrt{(e_{\iota} - \lambda)^2 + \Delta^2}, \quad (3.3.44)$$

alors

$$\frac{\partial u_{\iota}^2}{\partial q^n} = \frac{1}{2E_{\iota}^2} \left[\left(\frac{\partial e_{\iota}}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) E_{\iota} - (e_{\iota} - \lambda) \frac{\partial E_{\iota}}{\partial q^n} \right] \quad (3.3.45)$$

et

$$\frac{\partial E_{\iota}}{\partial q^n} = \frac{1}{2E_{\iota}} \left[2(e_{\iota} - \lambda) \left(\frac{\partial e_{\iota}}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) + 2\Delta \frac{\partial \Delta}{\partial q^n} \right], \quad (3.3.46)$$

puis

$$\frac{\partial u_{\iota}^2}{\partial q^n} = \frac{1}{2E_{\iota}^3} \left[\left(\frac{\partial e_{\iota}}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) E_{\iota}^2 - (e_{\iota} - \lambda)^2 \left(\frac{\partial e_{\iota}}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) - (e_{\iota} - \lambda) \Delta \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right] \quad (3.3.47)$$

4. Voir l'annexe C3 p. 139.

$$= \frac{1}{2E_l^3} \left[\left(\frac{\partial e_l}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) ((e_l - \lambda)^2 + \Delta^2) - (e_l - \lambda)^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) - (e_l - \lambda) \Delta \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right], \quad (3.3.48)$$

d'où

$$\frac{\partial u_l^2}{\partial q^n} = \frac{\Delta}{2E_l^3} \left[\left(\frac{\partial e_l}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) \Delta - (e_l - \lambda) \frac{\partial \Delta}{\partial q^n} \right], \quad (3.3.49)$$

et nous arrivons à une expression finale

$$\langle \Psi_{l,\kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) | \Phi_k(q) \rangle = -\text{sgn } l \frac{\delta_{-l\kappa}}{2E_l^2} \left[\left(\frac{\partial e_l}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) \Delta - (e_l - \lambda) \frac{\partial \Delta}{\partial q^n} \right]. \quad (3.3.50)$$

Calcul de $\langle \Psi_{l,\kappa} | \sum f_k(q) \frac{\partial}{\partial q^n} | \Phi_k(q) \rangle$

Nous poursuivons avec

$$\langle \Psi_{l,\kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} f_k(q) \frac{\partial}{\partial q^n} | \Phi_k(q) \rangle = \langle \Psi_{l,\kappa} | \sum_{\mu,\nu}^{\mathbb{Z}^*} \langle \psi_\mu | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\nu \rangle \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\nu | \Psi_0 \rangle \quad (3.3.51)$$

$$= \sum_{\mu,\nu}^{\mathbb{Z}^*} \langle \psi_\mu | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\nu \rangle \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\nu | \Psi_0 \rangle \quad (3.3.52)$$

et avec l'expression de la transformation de BOGOLIUBOV inverse :

$$\hat{c}_\mu^+ = u_\mu \hat{a}_\mu^+ + \text{sgn } \mu v_\mu \hat{a}_{-\mu}, \quad (3.3.53)$$

$$\hat{c}_\nu = u_\nu \hat{a}_\nu + \text{sgn } \nu v_\nu \hat{a}_{-\nu}^+, \quad (3.3.54)$$

en utilisant le fait que $|\Psi_0\rangle$ est le vide de quasiparticules, nous avons

$$\hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\nu | \Psi_0 \rangle = (u_\mu \hat{a}_\mu^+ + \text{sgn } \mu v_\mu \hat{a}_{-\mu}) (u_\nu \hat{a}_\nu + \text{sgn } \nu v_\nu \hat{a}_{-\nu}^+) | \Psi_0 \rangle \quad (3.3.55)$$

$$= u_\mu u_\nu \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\nu | \Psi_0 \rangle + \text{sgn } \nu u_\mu v_\nu \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_{-\nu}^+ | \Psi_0 \rangle + \text{sgn } \mu v_\mu u_\nu \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_\nu | \Psi_0 \rangle + \text{sgn } \mu \text{sgn } \nu v_\mu v_\nu \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\nu}^+ | \Psi_0 \rangle \quad (3.3.56)$$

$$= \text{sgn } \nu u_\mu v_\nu \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_{-\nu}^+ | \Psi_0 \rangle + \text{sgn } \mu \text{sgn } \nu v_\mu v_\nu \delta_{\mu\nu} | \Psi_0 \rangle - \text{sgn } \mu \text{sgn } \nu v_\mu v_\nu \hat{a}_{-\nu}^+ \hat{a}_{-\mu} | \Psi_0 \rangle \quad (3.3.57)$$

$$= \text{sgn } \nu (u_\mu v_\nu \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_{-\nu}^+ + \delta_{\mu\nu} \text{sgn } \mu v_\mu v_\nu) | \Psi_0 \rangle, \quad (3.3.58)$$

d'où

$$\hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\nu | \Psi_0 \rangle = \text{sgn } \nu (u_\mu v_\nu \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_{-\nu}^+ + \delta_{\mu\nu} \text{sgn } \mu v_\mu v_\nu) | \Psi_0 \rangle. \quad (3.3.59)$$

Nous pouvons donc transformer l'équation (3.3.52) en

$$\langle \Psi_{l,\kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} f_k(q) \frac{\partial}{\partial q^n} | \Phi_k(q) \rangle = \sum_{\mu,\nu}^{\mathbb{Z}^*} \langle \psi_\mu | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\nu \rangle \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \text{sgn } \nu (u_\mu v_\nu \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_{-\nu}^+ + \delta_{\mu\nu} \text{sgn } \mu v_\mu v_\nu) | \Psi_0 \rangle \quad (3.3.60)$$

dont nous voyons que le deuxième terme va s'annuler à cause du théorème 16 p. 109 puisque les annihilateurs de quasiparticules y agissent directement sur $|\Psi_0\rangle$. Il reste donc à calculer le premier terme, ce qui se fait très rapidement en appliquant le théorème de Gian Carlo WICK :

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_{-\nu}^+ | \Psi_0 \rangle = \delta_{\iota\mu} \delta_{\kappa-\nu} - \delta_{\kappa\mu} \delta_{\iota-\nu}, \quad (3.3.61)$$

alors

$$\langle \Psi_{\iota,\kappa} | \sum_k^N f_k(q) \frac{\partial}{\partial q^n} |\Phi_k(q)\rangle = -\text{sgn } \kappa u_\iota v_\kappa \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} |\psi_{-\kappa}\rangle + \text{sgn } \iota u_\kappa v_\iota \langle \psi_\kappa | \frac{\partial}{\partial q^n} |\psi_{-\iota}\rangle. \quad (3.3.62)$$

Nous pourrions nous arrêter à cette expression mais nous allons voir que le fait que des états temporellement conjugués interviennent nous permet encore de simplifier. Nous rappelons ici brièvement la manière dont l'opérateur de renversement du temps $\hat{\mathcal{T}}$ agit. Du fait de son antilinéarité, son action vers la gauche est différente de son action vers la droite. C'est pourquoi pour préciser que l'opérateur agit vers la gauche, nous ajoutons en indice une flèche gauche $\hat{\mathcal{T}}_{\leftarrow}$. Lorsque l'opérateur agit vers la droite (comme c'est le cas le plus fréquent pour un opérateur), nous ajoutons une flèche droite en indice $\hat{\mathcal{T}}_{\rightarrow}$ sauf s'il n'y a pas d'ambiguïté⁵. Nous partons de la propriété

$$\hat{\mathcal{T}}^2 = -\hat{\mathbb{1}}, \quad (3.3.63)$$

et alors

$$\hat{\mathcal{T}}_{\rightarrow} |\psi_\mu\rangle = \text{sgn } \mu |\psi_{-\mu}\rangle \quad \text{et} \quad \hat{\mathcal{T}}_{\rightarrow}^{-1} |\psi_\mu\rangle = -\text{sgn } \mu |\psi_{-\mu}\rangle, \quad (3.3.64)$$

$$\langle \psi_\nu | \hat{\mathcal{T}}_{\leftarrow}^{-1} = -\text{sgn } \nu \langle \psi_{-\nu} | \quad \text{et} \quad \langle \psi_\nu | \hat{\mathcal{T}}_{\leftarrow} = \text{sgn } \nu \langle \psi_{-\nu} |, \quad (3.3.65)$$

puisque

$$|\psi_{-\mu}\rangle = \hat{\mathcal{T}}_{\rightarrow}^{-1} \hat{\mathcal{T}}_{\rightarrow} |\psi_{-\mu}\rangle = \hat{\mathcal{T}}_{\rightarrow}^{-1} (-\text{sgn } \mu) |\psi_\mu\rangle = -\text{sgn } \mu \hat{\mathcal{T}}_{\rightarrow}^{-1} |\psi_\mu\rangle, \quad (3.3.66)$$

et de même pour les bras. L'antilinéarité se traduit par la relation bien connue

$$\langle \phi | \hat{\mathcal{T}}_{\leftarrow} | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{\mathcal{T}}_{\rightarrow} | \psi \rangle^*, \quad (3.3.67)$$

et il devient possible de réécrire le second terme puisque $\frac{\partial}{\partial q^n}$ est antihermitique dans l'espace sensible \mathbb{R}^3

$$\langle \psi_\kappa | \frac{\partial}{\partial q^n} |\psi_{-\iota}\rangle = -\langle \psi_{-\iota} | \frac{\partial}{\partial q^n} |\psi_\kappa\rangle^* \quad (3.3.68)$$

$$= -\text{sgn } \iota \langle \psi_\iota | \hat{\mathcal{T}}_{\leftarrow} \frac{\partial}{\partial q^n} |\psi_\kappa\rangle^* \quad (3.3.69)$$

$$= -\text{sgn } \iota \text{sgn } \kappa \langle \psi_\iota | \hat{\mathcal{T}}_{\leftarrow} \frac{\partial}{\partial q^n} \hat{\mathcal{T}}_{\rightarrow}^{-1} |\psi_{-\kappa}\rangle^* \quad (3.3.70)$$

5. Une autre possibilité intéressante symboliquement serait d'inverser le chapeau de l'opérateur ainsi

$$\hat{\mathcal{T}}_{\rightarrow} \equiv \hat{\mathcal{T}} \quad \text{et} \quad \hat{\mathcal{T}}_{\leftarrow} \equiv \tilde{\mathcal{T}}.$$

Par contre, il ne faudrait pas surmonter l'opérateur d'une flèche car ce n'est pas un opérateur vectoriel.

$$= -\operatorname{sgn} \iota \operatorname{sgn} \kappa \langle \psi_\iota | \hat{\mathcal{T}}_{\rightarrow} \frac{\partial}{\partial q^n} \hat{\mathcal{T}}_{\rightarrow}^{-1} | \psi_{-\kappa} \rangle \quad (3.3.71)$$

$$= -\operatorname{sgn} \iota \operatorname{sgn} \kappa \langle \psi_\iota | \hat{\mathcal{T}} \frac{\partial}{\partial q^n} \hat{\mathcal{T}}^{-1} | \psi_{-\kappa} \rangle \quad (3.3.72)$$

d'où

$$\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} f_k(q) \frac{\partial}{\partial q^n} | \Phi_k(q) \rangle = -\operatorname{sgn} \kappa u_\iota v_\kappa \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_{-\kappa} \rangle - \operatorname{sgn}^2 \iota \operatorname{sgn} \kappa u_\kappa v_\iota \langle \psi_\iota | \hat{\mathcal{T}} \frac{\partial}{\partial q^n} \hat{\mathcal{T}}^{-1} | \psi_{-\kappa} \rangle \quad (3.3.73)$$

$$= -\operatorname{sgn} \kappa \left(u_\iota v_\kappa \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_{-\kappa} \rangle + u_\kappa v_\iota \langle \psi_\iota | \hat{\mathcal{T}} \frac{\partial}{\partial q^n} \hat{\mathcal{T}}^{-1} | \psi_{-\kappa} \rangle \right). \quad (3.3.74)$$

Dans cette dernière expression nous voyons intervenir l'opérateur $\frac{\partial}{\partial q^n}$ renversé temporellement, c'est-à-dire $\hat{\mathcal{T}} \frac{\partial}{\partial q^n} \hat{\mathcal{T}}^{-1}$. Or, il est presque évident que⁶

$$\left[\hat{\mathcal{T}}, \frac{\partial}{\partial q^n} \right] = \hat{0}. \quad (3.3.75)$$

Par conséquent

$$\hat{\mathcal{T}} \frac{\partial}{\partial q^n} \hat{\mathcal{T}}^{-1} = \frac{\partial}{\partial q^n} \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{T}}^{-1} = \frac{\partial}{\partial q^n} \hat{1} = \frac{\partial}{\partial q^n}, \quad (3.3.76)$$

et finalement

$$\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} f_k(q) \frac{\partial}{\partial q^n} | \Phi_k(q) \rangle = -\operatorname{sgn} \kappa (u_\iota v_\kappa + u_\kappa v_\iota) \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_{-\kappa} \rangle. \quad (3.3.77)$$

L'expression du tenseur de masse

L'expression définitive est

$$\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle = -\operatorname{sgn} \iota \frac{\delta_{-\iota \kappa}}{2E_\iota^2} \left[\left(\frac{\partial e_\iota}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) \Delta - (e_\iota - \lambda) \frac{\partial \Delta}{\partial q^n} \right] - \operatorname{sgn} \kappa (u_\iota v_\kappa + u_\kappa v_\iota) \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_{-\kappa} \rangle. \quad (3.3.78)$$

Nous remontons maintenant à la formule du tenseur du masse où apparaît

$$\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^*,$$

6. Deux opérateurs qui agissent dans des espaces différents commutent toujours, or, $\frac{\partial}{\partial q}$ agit dans l'espace des q et $\hat{\mathcal{T}}$ agit dans l'espace usuel.

et pour écrire le développement de ce produit, nous avons encore besoin de l'expression du second facteur

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* &= -\operatorname{sgn} \iota \frac{\delta_{-\iota \kappa}}{2E_\iota^2} \left[\left(\frac{\partial e_\iota}{\partial q^k} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^k} \right) \Delta - (e_\iota - \lambda) \frac{\partial \Delta}{\partial q^k} \right] \\ &\quad + \operatorname{sgn} \kappa (u_\iota v_\kappa + u_\kappa v_\iota) \langle \psi_{-\kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle. \end{aligned} \quad (3.3.79)$$

Le développement du produit fait apparaître quatre termes que nous traitons séparément par pure commodité d'écriture. Ainsi

$$\begin{aligned} \left[\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* \right]_1 &= \frac{\delta_{-\iota \kappa}}{4E_\iota^4} \left[\left(\frac{\partial e_\iota}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) \Delta - (e_\iota - \lambda) \frac{\partial \Delta}{\partial q^n} \right] \\ &\quad \times \left[\left(\frac{\partial e_\iota}{\partial q^k} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^k} \right) \Delta - (e_\iota - \lambda) \frac{\partial \Delta}{\partial q^k} \right], \end{aligned} \quad (3.3.80)$$

$$\left[\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* \right]_2 = -(u_\iota v_\kappa + u_\kappa v_\iota)^2 \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_{-\kappa} \rangle \langle \psi_{-\kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle, \quad (3.3.81)$$

$$\left[\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* \right]_3 = \frac{\delta_{-\iota \kappa} \Delta}{E_\iota^3} \left[\left(\frac{\partial e_\iota}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) \Delta - (e_\iota - \lambda) \frac{\partial \Delta}{\partial q^n} \right] \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle, \quad (3.3.82)$$

$$\left[\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* \right]_4 = -\frac{\delta_{-\iota \kappa} \Delta}{E_\iota^3} \left[\left(\frac{\partial e_\iota}{\partial q^k} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^k} \right) \Delta - (e_\iota - \lambda) \frac{\partial \Delta}{\partial q^k} \right] \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle. \quad (3.3.83)$$

Nous rappelons derechef que les opérateurs $\frac{\partial}{\partial q^n}$ vus depuis l'espace usuel assurent que

$$\langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle^* = -\langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle, \quad (3.3.84)$$

ce qui signifie que

$$\langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle \in i\mathbb{R} \quad \text{ou} \quad \operatorname{Re} \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle = 0, \quad (3.3.85)$$

alors qu'on voit souvent écrit que

$$\langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle = 0 \quad (3.3.86)$$

du fait du caractère normé⁷ de l'état $|\psi_\iota\rangle$. Mais cette affirmation est fautive et nous ne savons rien de la partie imaginaire. Évidemment, si c'était systématiquement vrai, alors le troisième et le quatrième terme seraient toujours nuls.

7. L'état $|\psi_\iota\rangle$ est normé, c'est-à-dire

$$\langle \psi_\iota | \psi_\iota \rangle = 1 \quad (3.3.87)$$

donc

$$\frac{\partial}{\partial q^n} \langle \psi_\iota | \psi_\iota \rangle = 0 \quad (3.3.88)$$

et, puisque

$$\frac{\partial}{\partial q^n} \langle \psi_\iota | \psi_\iota \rangle = \frac{\partial}{\partial q^n} \int \psi_\iota^* \psi_\iota = \int \frac{\partial \psi_\iota^*}{\partial q^n} \psi_\iota + \int \psi_\iota^* \frac{\partial \psi_\iota}{\partial q^n} = \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle^* + \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle, \quad (3.3.89)$$

alors $\langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle^* = -\langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle$.

PROPOSITION 11 : CONJECTURE

$$\text{Im} \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle = 0, \quad (3.3.90)$$

qui implique que

$$\langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle = 0. \quad (3.3.91)$$

COROLLAIRE 3 : PREMIER COROLLAIRE DE LA CONJECTURE

$$\left[\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* \right]_3 = 0 \quad (3.3.92)$$

et

$$\left[\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* \right]_4 = 0. \quad (3.3.93)$$

Nous allons maintenant remplacer les opérateurs $\frac{\partial}{\partial q^n}$ par $\frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n}$ afin de retrouver la présentation habituelle.

THÉORÈME 18 : THÉORÈME DE HELLMANN-FEYNMAN-EPSTEIN⁸

Soit un hamiltonien qui dépend de paramètres continus q^n dont le spectre est discret et les valeurs propres et états propres tels que

$$\hat{H}(\hat{x}; q) | \psi_\mu(q) \rangle = e_\mu(q) | \psi_\mu(q) \rangle \quad (3.3.94)$$

et

$$\langle \psi_\nu(q) | \psi_\mu(q) \rangle = \delta_{\nu\mu}. \quad (3.3.95)$$

Alors

$$\langle \psi_\nu(q) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n}(\hat{x}; q) | \psi_\mu(q) \rangle = \frac{\partial e_\mu}{\partial q^n}(q) \delta_{\nu\mu} - [e_\nu(q) - e_\mu(q)] \langle \psi_\nu(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\mu(q) \rangle. \quad (3.3.96)$$

Nous appliquons ce théorème 18 à deux reprises, et d'abord dans le premier terme (3.3.80) p. 120 pour effectuer les substitutions

$$\frac{\partial e_\iota}{\partial q^n} = \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle, \quad \frac{\partial e_\iota}{\partial q^k} = \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle \quad (3.3.97)$$

et dans le second terme (3.3.81) p. 120 avec

$$\langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_{-\kappa} \rangle = -\frac{1}{e_\iota - e_\kappa} \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n} | \psi_{-\kappa} \rangle \quad \text{avec } \kappa \neq -\iota \quad (3.3.98)$$

8. Voir l'annexe D₃ p. 143.

et

$$\langle \psi_{-\kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle = \frac{1}{e_\iota - e_\kappa} \langle \psi_{-\kappa} | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle \quad \text{avec } \kappa \neq -\iota. \quad (3.3.99)$$

Ainsi

$$(3.3.80) \quad \left[\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* \right]_1 = \frac{\delta_{-\iota \kappa}}{4E_\iota^4} \left[\left(\frac{\partial e_\iota}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) \Delta - (e_\iota - \lambda) \frac{\partial \Delta}{\partial q^n} \right] \\ \times \left[\left(\frac{\partial e_\iota}{\partial q^k} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^k} \right) \Delta - (e_\iota - \lambda) \frac{\partial \Delta}{\partial q^k} \right]$$

devient en développant et en utilisant l'équation (3.3.97) p. 121

$$\left[\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* \right]_1 = \frac{\delta_{\kappa - \iota}}{4E_\iota^4} \left[P_{nk}^{\lambda\lambda} + P_{nk, \iota}^{HH} + P_{nk, \iota}^{\Delta\Delta} + P_{nk, \iota}^{\lambda\Delta} + P_{nk, \iota}^{\lambda H} + P_{nk, \iota}^{\Delta H} \right] \quad (3.3.100)$$

avec

$$P_{nk}^{\lambda\lambda} = \Delta^2 \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \frac{\partial \lambda}{\partial q^k} \quad (3.3.101)$$

$$P_{nk, \iota}^{HH} = \Delta^2 \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle \quad (3.3.102)$$

$$P_{nk, \iota}^{\Delta\Delta} = (e_\iota - \lambda)^2 \frac{\partial \Delta}{\partial q^n} \frac{\partial \Delta}{\partial q^k} \quad (3.3.103)$$

$$P_{nk, \iota}^{\lambda\Delta} = (e_\iota - \lambda) \Delta \left(\frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \frac{\partial \Delta}{\partial q^k} + \frac{\partial \Delta}{\partial q^n} \frac{\partial \lambda}{\partial q^k} \right) \quad (3.3.104)$$

$$P_{nk, \iota}^{\lambda H} = -\Delta^2 \left(\frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle + \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle \frac{\partial \lambda}{\partial q^k} \right) \quad (3.3.105)$$

$$P_{nk, \iota}^{\Delta H} = -(e_\iota - \lambda) \Delta \left(\frac{\partial \Delta}{\partial q^n} \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle + \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle \frac{\partial \Delta}{\partial q^k} \right) \quad (3.3.106)$$

et l'équation (3.3.81) p. 120 devient en utilisant les équations (3.3.98) p. 121 et (3.3.99)

$$\left[\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* \right]_2 = \frac{(u_\iota v_\kappa + u_\kappa v_\iota)^2}{(e_\iota - e_\kappa)^2} \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n} | \psi_{-\kappa} \rangle \langle \psi_{-\kappa} | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle \quad \text{avec } \kappa \neq -\iota \quad (3.3.107)$$

et

$$\left[\langle \Psi_{\iota, -\iota} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_{\iota, -\iota} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* \right]_2 = -4u_\iota^2 v_\iota^2 \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle. \quad (3.3.108)$$

COROLLAIRE 4 : SECOND COROLLAIRE DE LA CONJECTURE DE LA PROPOSITION 11

$$\left[\langle \Psi_{\iota, -\iota} | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_{\iota, -\iota} | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^* \right]_2 = 0. \quad (3.3.109)$$

Nous pouvons maintenant donner, non pas la formule définitive du tenseur de masse, mais une formule intermédiaire sur laquelle nous allons effectuer quelques approximations. Nous avons, p. 31,

$$(1.4.55) \quad B_{m\ell}(q; \tau) = 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_j^{\mathbb{N}^*} \frac{\aleph_{0j}}{\mathcal{E}_j - \mathcal{E}_0} \langle \Psi_j | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_j | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0 \rangle^*,$$

qui devient en utilisant l'identité au signe près des états $|\Psi_{\iota, \kappa}\rangle$ et $|\Psi_{\kappa, \iota}\rangle$

$$\begin{aligned} B_{m\ell}(q; \tau) &= 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{\iota}^{\mathbb{Z}^*} \frac{\aleph_{0(\iota, -\iota)}}{\mathcal{E}_{\iota, -\iota} - \mathcal{E}_0} \frac{1}{4E_\iota^4} \left[P_{nk}^{\lambda\lambda} + P_{nk, \iota}^{\Delta\Delta} + P_{nk, \iota}^{\lambda\Delta} + P_{nk, \iota}^{\lambda H} + P_{nk, \iota}^{\Delta H} + P_{nk, \iota}^{HH} \right] \times \frac{1}{2} \\ &+ 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{\iota}^{\mathbb{Z}^*} \sum_{\kappa}^{\mathbb{Z} \setminus \mathbb{Z}_{|\iota|}} \frac{\aleph_{0(\iota, \kappa)}}{\mathcal{E}_{\iota, \kappa} - \mathcal{E}_0} \frac{(u_\iota v_\kappa + u_\kappa v_\iota)^2}{(e_\iota - e_\kappa)^2} \langle \psi_{-\kappa} | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n} | \psi_{-\kappa} \rangle \langle \psi_{-\kappa} | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^k} | \psi_{-\kappa} \rangle \end{aligned} \quad (3.3.110)$$

et après simplification et en changeant κ en $-\kappa$, nous obtenons le théorème suivant sur le tenseur de masse.

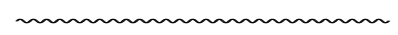
THÉORÈME 19 :

Dans le cadre d'une interaction de champ moyen, en présence d'un appariement monopolaire et uniforme et en considérant exclusivement des excitations à deux quasiparticules, l'expression du tenseur de masse est

$$\begin{aligned} B_{m\ell}(q; \tau) &= \frac{\hbar^2}{4} \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{\iota}^{\mathbb{Z}^*} \frac{\aleph_{0(\iota, -\iota)}}{\mathcal{E}_{\iota, -\iota} - \mathcal{E}_0} \frac{1}{E_\iota^4} \left[P_{nk}^{\lambda\lambda} + P_{nk, \iota}^{\Delta\Delta} + P_{nk, \iota}^{\lambda\Delta} + P_{nk, \iota}^{\lambda H} + P_{nk, \iota}^{\Delta H} + P_{nk, \iota}^{HH} \right] \\ &+ 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{\iota}^{\mathbb{Z}^*} \sum_{\kappa}^{\mathbb{Z} \setminus \mathbb{Z}_{|\iota|}} \frac{\aleph_{0(\iota, \kappa)}}{\mathcal{E}_{\iota, \kappa} - \mathcal{E}_0} \frac{(u_\iota v_\kappa + u_\kappa v_\iota)^2}{(e_\iota - e_\kappa)^2} \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n} | \psi_\kappa \rangle \langle \psi_\kappa | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle \end{aligned} \quad (3.3.111)$$

avec

$$\aleph_{0(\iota, \kappa)} = 2 - 2 \operatorname{sinc} \left(\frac{\mathcal{E}_{\iota, \kappa} - \mathcal{E}_0}{2\hbar} \tau \right). \quad (3.3.112)$$



Nous posons

$$P_{m\ell}(q; \tau) = \frac{\hbar^2}{4} \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{\iota}^{\mathbb{Z}^*} \frac{\aleph_{0(\iota, -\iota)}}{\mathcal{E}_{\iota, -\iota} - \mathcal{E}_0} \frac{1}{E_\iota^4} \left[P_{nk}^{\lambda\lambda} + P_{nk, \iota}^{\Delta\Delta} + P_{nk, \iota}^{\lambda\Delta} + P_{nk, \iota}^{\lambda H} + P_{nk, \iota}^{\Delta H} + P_{nk, \iota}^{HH} \right], \quad (3.3.113)$$

$$M_{m\ell}(q; \tau) = 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{\iota}^{\mathbb{Z}^*} \sum_{\kappa}^{\mathbb{Z} \setminus \mathbb{Z}_{|\iota|}} \frac{\aleph_{0(\iota, \kappa)}}{\mathcal{E}_{\iota, \kappa} - \mathcal{E}_0} \frac{(u_\iota v_\kappa + u_\kappa v_\iota)^2}{(e_\iota - e_\kappa)^2} \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n} | \psi_\kappa \rangle \langle \psi_\kappa | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle \quad (3.3.114)$$

et si la conjecture de la proposition 11 p. 121 est fausse, il faut ajouter le terme

$$C_{m\ell}(q; \tau) = \hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{\iota}^{\mathbb{Z}^*} \frac{\aleph_{0(\iota, -\iota)}}{\mathcal{E}_{\iota, -\iota} - \mathcal{E}_0} \frac{\Delta}{E_\iota^3}$$

$$\begin{aligned} & \times \left(\left[\left(\frac{\partial e_\iota}{\partial q^n} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^n} \right) \Delta - (e_\iota - \lambda) \frac{\partial \Delta}{\partial q^n} \right] \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle \right. \\ & - \left[\left(\frac{\partial e_\iota}{\partial q^k} - \frac{\partial \lambda}{\partial q^k} \right) \Delta - (e_\iota - \lambda) \frac{\partial \Delta}{\partial q^k} \right] \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle \\ & \left. - E_\iota \Delta \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^n} | \psi_\iota \rangle \langle \psi_\iota | \frac{\partial}{\partial q^k} | \psi_\iota \rangle \right). \end{aligned} \quad (3.3.115)$$

Le tenseur de masse avec quelques approximations

Il est d'usage dans la littérature de calculer le tenseur de masse dans le cadre de quelques approximations. Nous allons donc expliciter ces approximations. Le théorème 16 p. 109 nous donne l'énergie d'un état excité à deux quasiparticules

$$(3.1.27) \quad \mathcal{E}_{\iota,\kappa} = \mathcal{E}_0 + E_\iota + E_\kappa - G(u_\iota v_\iota + u_\kappa v_\kappa)^2 + G(v_\iota^4 + v_\kappa^4) - G\delta_{\kappa-\iota}(u_\iota^4 + v_\iota^4).$$

Nous précisons alors quelques ordres de grandeur assez répandus :

$$G \approx -0,1 \text{ MeV}, \quad (3.3.116)$$

$$E_\iota \approx E_\kappa \approx 1 \text{ MeV}, \quad (3.3.117)$$

et nous cherchons à voir l'influence des termes en u et v dans cette dernière expression. Ils sont les plus importants autour du niveau de FERMI avec

$$u_\iota \approx v_\iota \approx u_\kappa \approx v_\kappa \approx 0,5. \quad (3.3.118)$$

Alors

$$-G(u_\iota v_\iota + u_\kappa v_\kappa)^2 + G(v_\iota^4 + v_\kappa^4) - G\delta_{\kappa-\iota}(u_\iota^4 + v_\iota^4) \approx 0,01 \text{ MeV} + 0,01 \text{ MeV} \delta_{\kappa-\iota} \quad (3.3.119)$$

$$\approx 0,02 \text{ MeV} \quad (3.3.120)$$

$$\ll E_\iota + E_\kappa. \quad (3.3.121)$$

Ainsi nous pouvons faire l'approximation

$$\mathcal{E}_{\iota,\kappa} - \mathcal{E}_0 \approx E_\iota + E_\kappa, \quad (3.3.122)$$

où nous avons négligé les termes d'ordre 4 en u et v . Nous poursuivons la discussion des approximations possibles sur un autre terme :

$$E_\iota = \sqrt{(e_\iota - \lambda)^2 + \Delta^2} = (e_\iota - \lambda) \sqrt{1 + \frac{\Delta^2}{(e_\iota - \lambda)^2}} \operatorname{sgn}(e_\iota - \lambda) \approx \left[e_\iota - \lambda + \frac{\Delta^2}{2(e_\iota - \lambda)} \right] \operatorname{sgn}(e_\iota - \lambda). \quad (3.3.123)$$

Si nous considérons qu'à la limite de l'appariement nul

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} |\Psi_{\iota,\kappa}\rangle = \operatorname{sgn} \iota |\Psi_{-\iota \rightarrow \kappa}\rangle, \quad (3.3.124)$$

$|\psi_{-\iota}\rangle$ est un trou d'énergie $e_{-\iota} = e_{\iota}$ et $|\psi_{\kappa}\rangle$ une particule d'énergie e_{κ} alors

$$\text{sgn}(e_{\iota} - \lambda) = -1 \quad \text{et} \quad \text{sgn}(e_{\kappa} - \lambda) = 1, \quad (3.3.125)$$

et nous arrivons à

$$E_{\iota} + E_{\kappa} \approx (e_{\kappa} - e_{\iota}) \left[1 - \frac{\Delta^2}{2(e_{\iota} - \lambda)(e_{\kappa} - \lambda)} \right] \quad (3.3.126)$$

ou, dit autrement,

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} \mathcal{E}_{\iota, \kappa} = \mathcal{E}_{-\iota \rightarrow \kappa} = \mathcal{E}_0 + e_{\kappa} - e_{\iota} \quad (3.3.127)$$

et (3.3.112) p. 123 devient

$$\aleph_{0(\iota, \kappa)} = 2 - 2 \text{sinc} \left(\frac{E_{\iota} + E_{\kappa}}{2\hbar} \tau \right). \quad (3.3.128)$$

COROLLAIRE 5 :

Dans ce cadre d'approximation, l'expression (3.3.111) du théorème 19 p. 123 du tenseur de masse devient

$$\begin{aligned} B_{m\ell}(q; \tau) \approx & \frac{\hbar^2}{8} \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{\iota}^{\mathbb{Z}^*} \frac{\aleph_{0(\iota, -\iota)}}{E_{\iota}^5} \left[P_{nk}^{\lambda\lambda} + P_{nk, \iota}^{\Delta\Delta} + P_{nk, \iota}^{\lambda\Delta} + P_{nk, \iota}^{\lambda H} + P_{nk, \iota}^{\Delta H} + P_{nk, \iota}^{HH} \right] \\ & + 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_{\iota}^{\mathbb{Z}^*} \sum_{\kappa}^{\mathbb{Z} \setminus \mathbb{Z}_{|\iota|}} \frac{\aleph_{0(\iota, \kappa)}}{(E_{\iota} + E_{\kappa})^3} (u_{\iota} v_{\kappa} + u_{\kappa} v_{\iota})^2 \langle \psi_{\iota} | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n} | \psi_{\kappa} \rangle \langle \psi_{\kappa} | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^k} | \psi_{\iota} \rangle. \end{aligned} \quad (3.3.129)$$

SCOLIE 5 :

L'expression (3.3.129) du tenseur de masse est très proche de l'expression formulée dans [23] à la page 388 et [24] à la page 40 (bibliographie p. 145), dont nous avons juste recontextualisé la notation :

$$\begin{aligned} B_{m\ell}(q) \approx & \frac{\hbar^2}{4} \sum_{\iota} \frac{1}{E_{\iota}^5} \left[P_{m\ell}^{\lambda\lambda} + P_{m\ell, \iota}^{\Delta\Delta} + P_{m\ell, \iota}^{\lambda\Delta} + P_{m\ell, \iota}^{\lambda H} + P_{m\ell, \iota}^{\Delta H} \right] \\ & + 2\hbar^2 \sum_{\iota, \kappa} \frac{1}{(E_{\iota} + E_{\kappa})^3} (u_{\iota} v_{\kappa} + v_{\iota} u_{\kappa})^2 \langle \psi_{\iota} | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^m} | \psi_{\kappa} \rangle \langle \psi_{\kappa} | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^{\ell}} | \psi_{\iota} \rangle. \end{aligned} \quad (3.3.130)$$

Ces deux formules, qui sont assez similaires, présentent néanmoins des différences qu'il est important de signaler et de comprendre. Tout d'abord les facteurs \mathcal{D}_m^n et \mathcal{D}_ℓ^{k*} introduits au chapitre 1 dans le lemme 2 p. 20 et qui sont égaux à δ_m^n et δ_ℓ^k si l'on s'intéresse exclusivement aux déformations axiales mais qui ont un impact plus significatif dans le cas des symétries de haut rang en particulier. Ensuite les facteurs \aleph également introduits au chapitre 1 dans le théorème 3 p. 31 afin de prendre rigoureusement en compte le caractère collectif des grandeurs, c'est-à-dire de grandeurs évoluant sur une durée τ_{col} bien supérieure à la durée d'évolution d'un nucléon dans le noyau τ_{ind} . Enfin l'existence du terme $P_{nk, \iota}^{HH}$ et l'absence des intervalles de sommation et le facteur $\frac{\hbar^2}{8}$ au lieu de $\frac{\hbar^2}{4}$ devant la première somme. Nous avons déjà traité longuement des

deux premières différences au chapitre 1. Parlons donc de la dernière. En reprenant l'équation (3.3.102) p. 122, nous avons l'équivalent de $P_{nk,\iota}^{HH}$

$$P_{m\ell,\iota}^{HH} = \Delta^2 \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^m} | \psi_\iota \rangle \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^\ell} | \psi_\iota \rangle. \quad (3.3.131)$$

Or,

$$\Delta = 2E_\iota u_\iota v_\iota, \quad (3.3.132)$$

donc

$$\frac{\hbar^2}{4} \sum_\iota \frac{1}{E_\iota^5} P_{m\ell,\iota}^{HH} = \frac{\hbar^2}{4} \sum_\iota \frac{1}{E_\iota^5} 4E_\iota^2 u_\iota^2 v_\iota^2 \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^m} | \psi_\iota \rangle \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^\ell} | \psi_\iota \rangle \quad (3.3.133)$$

$$= 2\hbar^2 \sum_\iota \frac{1}{(E_\iota + E_\iota)^3} (u_\iota v_\iota + u_\iota v_\iota)^2 \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^m} | \psi_\iota \rangle \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^\ell} | \psi_\iota \rangle. \quad (3.3.134)$$

Nous voyons donc que ce terme $P_{m\ell,\iota}^{HH}$ peut être mis sous la forme d'un terme de la seconde somme, un terme qui en est justement absent puisqu'il correspond à $\kappa = \iota$ qui en est exclu. Nous retrouvons donc la cohérence des deux formules sur ce point. Cependant nous conservons $P_{nk,\iota}^{HH}$ afin de ne pas ajouter artificiellement un terme dans $M_{m\ell}$ et ainsi permettre sa continuité avec le tenseur de masse en l'absence d'appariement, et aussi à cause du facteur $\frac{\hbar^2}{8}$. Nous expliquons ce facteur pour éviter un double comptage des états $|\Psi_{\iota,-\iota}\rangle$.

Nous sommes restés dans le cadre général des grandeurs collectives mais en fait nous nous intéressons plus particulièrement aux coordonnées de formes α_λ^μ correspondant au développement de la forme du noyau sur la base des harmoniques sphériques. Ces coordonnées de forme sont aptes, comme nous l'avons montré au chapitre 2, à traiter des symétries géométriques du noyau et des transitions de forme. Nous réécrivons donc l'expression du tenseur de masse dans ce contexte :

$$\begin{aligned} B_{(\mu\nu)(\rho\sigma)}(\alpha; \tau) \approx & \frac{\hbar^2}{8} \mathcal{D}_{\mu'\nu'}^{\mu\nu} \mathcal{D}_{\rho'\sigma'}^{\rho\sigma*} \sum_\iota^{\mathbb{Z}^*} \frac{\aleph_{0(\iota,-\iota)}}{E_\iota^5} \left[P_{(\mu'\nu')(\rho'\sigma')}^{\lambda\lambda} + P_{(\mu'\nu')(\rho'\sigma'),\iota}^{\Delta\Delta} + P_{(\mu'\nu')(\rho'\sigma'),\iota}^{\lambda\Delta} \right. \\ & \left. + P_{(\mu'\nu')(\rho'\sigma'),\iota}^{\lambda H} + P_{(\mu'\nu')(\rho'\sigma'),\iota}^{\Delta H} + P_{(\mu'\nu')(\rho'\sigma'),\iota}^{HH} \right] \\ & + 2\hbar^2 \mathcal{D}_{\mu'\nu'}^{\mu\nu} \mathcal{D}_{\rho'\sigma'}^{\rho\sigma*} \sum_\iota^{\mathbb{Z}^*} \sum_{\kappa}^{\mathbb{Z} \setminus \mathbb{Z}_{|\iota|}} \frac{\aleph_{0(\iota,\kappa)}}{(E_\iota + E_\kappa)^3} (u_\iota v_\kappa + u_\kappa v_\iota)^2 \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha_{\mu'\nu'}} | \psi_\kappa \rangle \langle \psi_\kappa | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha_{\rho'\sigma'}} | \psi_\iota \rangle, \quad (3.3.135) \end{aligned}$$

avec

$$P_{(\mu'\nu')(\rho'\sigma')}^{\lambda\lambda} = \Delta^2 \frac{\partial \lambda}{\partial \alpha_{\mu'\nu'}} \frac{\partial \lambda}{\partial \alpha_{\rho'\sigma'}} \quad (3.3.136)$$

$$P_{(\mu'\nu')(\rho'\sigma'),\iota}^{HH} = \Delta^2 \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha_{\mu'\nu'}} | \psi_\iota \rangle \langle \psi_\iota | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha_{\rho'\sigma'}} | \psi_\iota \rangle \quad (3.3.137)$$

$$P_{(\mu'\nu')(\rho'\sigma'),\iota}^{\Delta\Delta} = (e_\iota - \lambda)^2 \frac{\partial \Delta}{\partial \alpha_{\mu'\nu'}} \frac{\partial \Delta}{\partial \alpha_{\rho'\sigma'}} \quad (3.3.138)$$

$$P_{(\mu'\nu')(\rho'\sigma'),\iota}^{\lambda\Delta} = (e_\iota - \lambda)\Delta \left(\frac{\partial\lambda}{\partial\alpha_{\mu'\nu'}} \frac{\partial\Delta}{\partial\alpha_{\rho'\sigma'}} + \frac{\partial\Delta}{\partial\alpha_{\mu'\nu'}} \frac{\partial\lambda}{\partial\alpha_{\rho'\sigma'}} \right) \quad (3.3.139)$$

$$P_{(\mu'\nu')(\rho'\sigma'),\iota}^{\lambda H} = -\Delta^2 \left(\frac{\partial\lambda}{\partial\alpha_{\mu'\nu'}} \langle \psi_\iota | \frac{\partial\hat{H}}{\partial\alpha_{\rho'\sigma'}} | \psi_\iota \rangle + \langle \psi_\iota | \frac{\partial\hat{H}}{\partial\alpha_{\mu'\nu'}} | \psi_\iota \rangle \frac{\partial\lambda}{\partial\alpha_{\rho'\sigma'}} \right) \quad (3.3.140)$$

$$P_{(\mu'\nu')(\rho'\sigma'),\iota}^{\Delta H} = -(e_\iota - \lambda)\Delta \left(\frac{\partial\Delta}{\partial\alpha_{\mu'\nu'}} \langle \psi_\iota | \frac{\partial\hat{H}}{\partial\alpha_{\rho'\sigma'}} | \psi_\iota \rangle + \langle \psi_\iota | \frac{\partial\hat{H}}{\partial\alpha_{\mu'\nu'}} | \psi_\iota \rangle \frac{\partial\Delta}{\partial\alpha_{\rho'\sigma'}} \right). \quad (3.3.141)$$

Nous devons utiliser cette expression du tenseur de masse pour résoudre numériquement l'équation de SCHRÖDINGER collective, p. 20,

$$(1.2.47) \quad \hat{\mathcal{H}} |\Upsilon(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Upsilon(t)\rangle.$$

Nous allons aborder ce sujet plus en détail au chapitre 6, mais comme nous l'avons déjà souligné à la fin du chapitre 1, l'énergie cinétique collective donnée dans le théorème 4 p. 31

$$(1.4.53) \quad \bar{T}(q, \dot{q}; \tau) \approx \frac{1}{2} B_{m\ell}(q; \tau) \dot{q}^m \dot{q}^{\ell*},$$

qui doit être quantifiée pour définir le hamiltonien collectif $\hat{\mathcal{H}}$, est déterminée de manière essentielle par le tenseur de masse.

Maintenant que l'inertie collective du noyau est déterminable en même temps que le mouvement individuel des nucléons, nous allons montrer des résultats de nos calculs pour quelques noyaux particuliers afin de préparer la palpitante confrontation de la théorie avec l'expérience.

Annexes du chapitre 3

Annexe A₃

Énergie d'un état en présence de l'appariement

L'énergie de l'état fondamental est, p. 109,

$$(3.1.24) \quad \mathcal{E}_0 = \langle \Psi_0 | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_0 \rangle = \sum_{\mu}^{\mathbf{N}^*} (e_{\mu} - \lambda) \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\mu} | \Psi_0 \rangle + \sum_{\mu}^{\mathbf{N}^*} (e_{\mu} - \lambda) \langle \Psi_0 | \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\mu} | \Psi_0 \rangle \\ - G \sum_{\mu, \nu}^{\mathbf{N}^*} \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\nu} \hat{c}_{\nu} | \Psi_0 \rangle$$

et, à l'aide de la transformation de BOGOLIUBOV inverse explicitée dans le théorème 13 p. 107, nous avons

$$\hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{\mu} = u_{\mu}^2 \hat{a}_{\mu}^+ \hat{a}_{\mu} + v_{\mu} u_{\mu} \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{\mu} + u_{\mu} v_{\mu} \hat{a}_{\mu}^+ \hat{a}_{-\mu}^+ + v_{\mu}^2 \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \quad (\text{A}_3.1)$$

pour calculer le premier terme de (3.1.24),

$$\hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\mu} = u_{\mu}^2 \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\mu} - v_{\mu} u_{\mu} \hat{a}_{\mu} \hat{a}_{-\mu} - u_{\mu} v_{\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{\mu}^+ + v_{\mu}^2 \hat{a}_{\mu} \hat{a}_{\mu}^+ \quad (\text{A}_3.2)$$

pour calculer le deuxième terme de (3.1.24),

$$\hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ = u_{\mu}^2 \hat{a}_{\mu}^+ \hat{a}_{-\mu}^+ - v_{\mu} u_{\mu} \hat{a}_{\mu}^+ \hat{a}_{\mu} + u_{\mu} v_{\mu} \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ - v_{\mu}^2 \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{\mu}, \quad (\text{A}_3.3)$$

$$\hat{c}_{-\nu} \hat{c}_{\nu} = u_{\nu}^2 \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_{\nu} + u_{\nu} v_{\nu} \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_{-\nu}^+ - v_{\nu} u_{\nu} \hat{a}_{\nu}^+ \hat{a}_{\nu} - v_{\nu}^2 \hat{a}_{\nu}^+ \hat{a}_{-\nu}^+ \quad (\text{A}_3.4)$$

pour calculer le troisième terme de (3.1.24) et dans chaque cas, (A_{3.1}), (A_{3.2}), (A_{3.3}) et (A_{3.4}), il n'y a que le quatrième terme qui ne disparaît pas dans le braket (3.1.24). Ainsi

$$\mathcal{E}_0 = 2 \sum_{\mu}^{\mathbf{N}^*} (e_{\mu} - \lambda) v_{\mu}^2 - G \sum_{\mu, \nu}^{\mathbf{N}^*} u_{\mu} v_{\mu} u_{\nu} v_{\nu} \langle \Psi_0 | \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_{-\nu}^+ | \Psi_0 \rangle$$

$$- G \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{N}^*} v_\mu^2 v_\nu^2 \langle \Psi_0 | \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_{-\nu}^+ | \Psi_0 \rangle \quad (\text{A3.5})$$

c'est-à-dire

$$\mathcal{E}_0 = 2 \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} (e_\mu - \lambda) v_\mu^2 - G \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{N}^*} u_\mu v_\mu u_\nu v_\nu - G \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{N}^*} v_\mu^2 v_\nu^2 \delta_{\mu\nu} + G \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{N}^*} v_\mu^2 v_\nu^2 \delta_{-\mu\nu} \quad (\text{A3.6})$$

et

$$\mathcal{E}_0 = 2 \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} (e_\mu - \lambda) v_\mu^2 - G \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{N}^*} u_\mu v_\mu u_\nu v_\nu - G \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} v_\mu^4 \quad (\text{A3.7})$$

ou, comme affirmé dans le théorème 16 p. 109 en utilisant la définition 5 p. 108 de l'énergie d'appariement, à savoir $\Delta = G \sum u_\mu v_\mu$,

$$(3.1.26) \quad \mathcal{E}_0 = 2 \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} (e_\mu - \lambda) v_\mu^2 - G \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} v_\mu^4 - \frac{\Delta^2}{G}.$$

Maintenant l'expression de l'énergie d'un état excité à deux quasiparticules est :

$$(3.1.25) \quad \begin{aligned} \mathcal{E}_{\iota, \kappa} = \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_{\iota, \kappa} \rangle &= \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} (e_\mu - \lambda) [\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\mu \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\mu} \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle] \\ &\quad - G \sum_{\mu, \nu}^{\mathbb{N}^*} \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\nu} \hat{c}_\nu \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \end{aligned}$$

avec le théorème de WICK, nous obtenons

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_\mu \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (\text{A3.8})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 0; \quad (\text{A3.9})$$

alors

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\mu \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = u_\mu^2 \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\mu \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle + v_\mu^2 \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \quad (\text{A3.10})$$

et

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\mu \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = \delta_{\mu\iota} + \delta_{\mu\kappa}, \quad (\text{A3.11})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 1 - \delta_{\mu-\iota} + \delta_{\mu-\kappa}; \quad (\text{A3.12})$$

alors

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\mu \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = u_\mu^2 (\delta_{\mu\iota} + \delta_{\mu\kappa}) + v_\mu^2 (1 - \delta_{\mu-\iota} + \delta_{\mu-\kappa}) \quad (\text{A3.13})$$

et

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_\iota \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\mu} \hat{a}_\iota^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = u_\mu^2 (\delta_{\mu-\iota} + \delta_{\mu-\kappa}) + v_\mu^2 (1 - \delta_{\mu\iota} + \delta_{\mu\kappa}); \quad (\text{A3.14})$$

donc

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\mu \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\mu} \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \quad (\text{A3.15})$$

$$= 2v_\mu^2 + (u_\mu^2 - v_\mu^2)(\delta_{\mu l} + \delta_{\mu -l} + \delta_{\mu \kappa} + \delta_{\mu -\kappa}) \quad (\text{A3.16})$$

$$= 2v_\mu^2 + (u_\mu^2 - v_\mu^2)(\delta_{\mu|l|} + \delta_{\mu|\kappa|}), \quad (\text{A3.17})$$

$$\begin{aligned} & \sum_{\mu}^{\text{N}^*} (e_\mu - \lambda) [\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_\mu \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\mu} \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle] \\ &= 2 \sum_{\mu}^{\text{N}^*} (e_\mu - \lambda) v_\mu^2 + (e_l - \lambda)(u_l^2 - v_l^2) + (e_\kappa - \lambda)(u_\kappa^2 - v_\kappa^2). \quad (\text{A3.18}) \end{aligned}$$

Avec le théorème de WICK nous obtenons

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (\text{A3.19})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_\nu \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (\text{A3.20})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (\text{A3.21})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\mu \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (\text{A3.22})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (\text{A3.23})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (\text{A3.24})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (\text{A3.25})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_\mu \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (\text{A3.26})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_\mu \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_{-\nu}^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (\text{A3.27})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_\nu \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = 0; \quad (\text{A3.28})$$

alors

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\nu} \hat{c}_\nu a_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle &= u_\mu^2 u_\nu^2 \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_\nu a_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \\ &\quad - v_\mu u_\mu u_\nu v_\nu \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\mu \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_{-\nu}^+ a_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \\ &\quad + v_\mu u_\mu v_\nu u_\nu \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_\nu a_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \\ &\quad + u_\mu v_\mu u_\nu v_\nu \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_{-\nu}^+ a_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \\ &\quad - u_\mu v_\mu v_\nu u_\nu \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_\nu a_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \\ &\quad + v_\mu^2 v_\nu^2 \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_{-\nu}^+ a_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \quad (\text{A3.29}) \end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\nu} \hat{c}_\nu a_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle &= u_\mu^2 u_\nu^2 \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_\nu a_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \\ &\quad + u_\mu v_\mu u_\nu v_\nu (- \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\mu \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_{-\nu}^+ a_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \\ &\quad + \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_\nu a_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_{-\nu}^+ a_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle) \end{aligned}$$

$$- \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_\nu \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle + v_\mu^2 v_\nu^2 \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \quad (\text{A3.30})$$

et

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_\nu \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = \delta_{\kappa-l} (\delta_{\mu-l} - \delta_{\mu-\nu}) (\delta_{\nu-l} - \delta_{\nu-\nu}) \quad (\text{A3.31})$$

$$= \delta_{\kappa-l} \text{sgn } l \delta_{|\mu|l} \text{sgn } l \delta_{|\nu|l} \quad (\text{A3.32})$$

$$= \delta_{\kappa-l} \delta_{|\mu|l} \delta_{|\nu|l}, \quad (\text{A3.33})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = \delta_{\mu\nu} + \delta_{\mu\kappa} - \delta_{\mu l} \delta_{\nu-l} - \delta_{\mu l} \delta_{\nu-\kappa} - \delta_{\mu\kappa} \delta_{\nu-l} - \delta_{\mu\kappa} \delta_{\nu-\kappa}, \quad (\text{A3.34})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_\nu \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = \delta_{\mu l} \delta_{\nu l} + \delta_{\mu l} \delta_{\nu\kappa} + \delta_{\mu\kappa} \delta_{\nu l} + \delta_{\mu\kappa} \delta_{\nu\kappa}, \quad (\text{A3.35})$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle &= 1 - \delta_{\mu-l} - \delta_{\mu-\kappa} - \delta_{\nu-l} - \delta_{\nu-\kappa} \\ &\quad + \delta_{\mu-l} \delta_{\nu-l} + \delta_{\mu-l} \delta_{\nu-\kappa} + \delta_{\mu-\kappa} \delta_{\nu-l} + \delta_{\mu-\kappa} \delta_{\nu-\kappa}, \end{aligned} \quad (\text{A3.36})$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_\nu \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle = \delta_{\nu l} + \delta_{\nu\kappa} - \delta_{\mu-l} \delta_{\nu l} - \delta_{\mu-l} \delta_{\nu\kappa} - \delta_{\mu-\kappa} \delta_{\nu l} - \delta_{\mu-\kappa} \delta_{\nu\kappa}, \quad (\text{A3.37})$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle &= \delta_{\mu\nu} - \delta_{\mu-\nu} + (\delta_{\kappa-l} - 1) (\delta_{\mu l} - \delta_{\mu-l}) (\delta_{\nu l} - \delta_{\nu-l}) \\ &\quad - (\delta_{\mu\kappa} - \delta_{\mu-\kappa}) (\delta_{\nu\kappa} - \delta_{\nu-\kappa}) \\ &= \delta_{\mu\nu} - \delta_{\mu-\nu} + (\delta_{\kappa-l} - 1) \delta_{|\mu|l} \delta_{|\nu|l} - \delta_{|\mu|\kappa} \delta_{|\nu|\kappa}; \end{aligned} \quad (\text{A3.38})$$

alors

$$\begin{aligned} & - \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_\nu \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \\ & + \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_{-\nu} \hat{a}_{-\nu}^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle - \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa \hat{a}_l \hat{a}_{-\mu} \hat{a}_{-\mu}^+ \hat{a}_\nu \hat{a}_\nu^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_\kappa^+ | \Psi_0 \rangle \\ & = 1 - \delta_{|\mu|l} - \delta_{|\mu|\kappa} - \delta_{|\nu|l} - \delta_{|\nu|\kappa} \\ & \quad + \delta_{|\mu|l} \delta_{|\nu|l} + \delta_{|\mu|l} \delta_{|\nu|\kappa} + \delta_{|\mu|\kappa} \delta_{|\nu|l} + \delta_{|\mu|\kappa} \delta_{|\nu|\kappa} \end{aligned} \quad (\text{A3.39})$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{l,\kappa} &= 2 \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} (e_\mu - \lambda) v_\mu^2 + (e_l - \lambda) (u_l^2 - v_l^2) + (e_\kappa - \lambda) (u_\kappa^2 - v_\kappa^2) \\ & - \frac{\Delta^2}{G} + 2\Delta (u_l v_l + u_\kappa v_\kappa) - G (u_l v_l + u_\kappa v_\kappa)^2 - G \sum_{\mu}^{\mathbb{N}^*} v_\mu^4 \\ & \quad + G (v_l^4 + v_\kappa^4) - G \delta_{\kappa-l} (u_l^4 + v_l^4). \end{aligned} \quad (\text{A3.40})$$

Alors en utilisant

$$u_l^2 - v_l^2 = \frac{e_l - \lambda}{E_l}, \quad (\text{A3.41})$$

$$u_l v_l = \frac{\Delta}{2E_l}, \quad (\text{A3.42})$$

$$E_l^2 = (e_l - \lambda)^2 + \Delta^2 \quad (\text{A3.43})$$

résultant des définitions 5 et 6 p. 108 et du théorème 15 p. 108, nous obtenons comme annoncé dans le théorème 16 p. 109

$$(3.1.27) \quad \mathcal{E}_{l,\kappa} = \mathcal{E}_0 + E_l + E_\kappa - G (u_l v_l + u_\kappa v_\kappa)^2 + G (v_l^4 + v_\kappa^4) - G \delta_{\kappa-l} (u_l^4 + v_l^4).$$

Annexe B₃

Le vide de quasiparticules

Avec la transformation de BOGOLIUBOV et l'introduction des quasiparticules, l'état fondamental donné dans la proposition 9 p. 106

$$(3.1.8) \quad |\Psi_0\rangle = \prod_{\mu}^{\mathbb{N}^*} (u_{\mu} + v_{\mu} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+) |\emptyset\rangle$$

est interprété comme le vide de quasiparticules. Nous allons montrer la validité de cette interprétation et démontrer au passage quelques relations utiles. Considérons l'action d'un annihilateur de quasiparticules sur l'état fondamental :

$$\hat{a}_{\kappa} |\Psi_0\rangle = \hat{a}_{\kappa} \prod_{\mu}^{\mathbb{N}^*} (u_{\mu} + v_{\mu} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+) |\emptyset\rangle \quad (\text{B3.1})$$

$$= \hat{a}_{\kappa} \prod_{\mu < |\kappa|} (u_{\mu} + v_{\mu} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+) \left(u_{\kappa} + v_{\kappa} \hat{c}_{|\kappa|}^+ \hat{c}_{-|\kappa|}^+ \right) \prod_{\mu > |\kappa|} (u_{\mu} + v_{\mu} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+) |\emptyset\rangle, \quad (\text{B3.2})$$

et nous comprenons qu'il est judicieux d'établir au préalable la relation de commutation entre

$$\hat{a}_{\kappa} \quad \text{et} \quad u_{\mu} + v_{\mu} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+.$$

Pour cela nous utilisons la transformation de BOGOLIUBOV, qui donne

$$\hat{a}_{\kappa} = u_{\kappa} \hat{c}_{\kappa} - \text{sgn } \kappa v_{\kappa} \hat{c}_{-\kappa}^+, \quad (\text{B3.3})$$

et alors

$$\hat{a}_{\kappa} (u_{\mu} + v_{\mu} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+) = u_{\mu} \hat{a}_{\kappa} + (u_{\kappa} \hat{c}_{\kappa} - \text{sgn } \kappa v_{\kappa} \hat{c}_{-\kappa}^+) v_{\mu} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \quad (\text{B3.4})$$

$$= u_{\mu} \hat{a}_{\kappa} + v_{\mu} u_{\kappa} \hat{c}_{\kappa} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ - \text{sgn } \kappa v_{\mu} v_{\kappa} \hat{c}_{-\kappa}^+ \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \quad (\text{B3.5})$$

$$= u_{\mu} \hat{a}_{\kappa} + v_{\mu} u_{\kappa} (\delta_{\mu\kappa} \hat{c}_{-\mu}^+ - \delta_{-\mu\kappa} \hat{c}_{\mu}^+) + v_{\mu} u_{\kappa} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{\kappa} - \text{sgn } \kappa v_{\mu} v_{\kappa} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{c}_{-\kappa}^+ \quad (\text{B3.6})$$

$$= v_{\mu} u_{\kappa} (\delta_{\mu\kappa} \hat{c}_{-\mu}^+ - \delta_{-\mu\kappa} \hat{c}_{\mu}^+) + u_{\mu} \hat{a}_{\kappa} + v_{\mu} \hat{c}_{\mu}^+ \hat{c}_{-\mu}^+ (u_{\kappa} \hat{c}_{\kappa} - \text{sgn } \kappa v_{\kappa} \hat{c}_{-\kappa}^+) \quad (\text{B3.7})$$

$$= v_\mu u_\kappa (\delta_{\mu\kappa} \hat{c}_{-\mu}^+ - \delta_{-\mu\kappa} \hat{c}_\mu^+) + u_\mu \hat{a}_\kappa + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \hat{a}_\kappa. \quad (\text{B3.8})$$

Donc finalement

$$\hat{a}_\kappa (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) = v_\mu u_\kappa (\delta_{\mu\kappa} \hat{c}_{-\mu}^+ - \delta_{-\mu\kappa} \hat{c}_\mu^+) + (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) \hat{a}_\kappa. \quad (\text{B3.9})$$

Alors en appliquant cette relation de commutation d'abord sur $\mu \neq |\kappa|$ puis $\mu = |\kappa|$, nous avons

$$\hat{a}_\kappa |\Psi_0\rangle = \hat{a}_\kappa \prod_{\substack{\mu \\ \mu \neq |\kappa|}}^{\mathbb{N}^*} (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) (u_\kappa + v_\kappa \hat{c}_{|\kappa|}^+ \hat{c}_{-|\kappa|}^+) |\emptyset\rangle \quad (\text{B3.10})$$

$$= \prod_{\substack{\mu \\ \mu \neq |\kappa|}}^{\mathbb{N}^*} (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) \hat{a}_\kappa (u_\kappa + v_\kappa \hat{c}_{|\kappa|}^+ \hat{c}_{-|\kappa|}^+) |\emptyset\rangle \quad (\text{B3.11})$$

$$= \prod_{\substack{\mu \\ \mu \neq |\kappa|}}^{\mathbb{N}^*} (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) u_\kappa v_\kappa (\delta_{|\kappa|\kappa} \hat{c}_{-|\kappa|}^+ - \delta_{-|\kappa|\kappa} \hat{c}_{|\kappa|}^+) |\emptyset\rangle \\ + \prod_{\substack{\mu \\ \mu \neq |\kappa|}}^{\mathbb{N}^*} (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) (u_\kappa + v_\kappa \hat{c}_{|\kappa|}^+ \hat{c}_{-|\kappa|}^+) \hat{a}_\kappa |\emptyset\rangle, \quad (\text{B3.12})$$

puis en utilisant la transformation de BOGOLIUBOV et en sachant que la double action d'un créateur identique conduit à zéro, nous avons

$$\hat{a}_\kappa |\Psi_0\rangle = \prod_{\substack{\mu \\ \mu \neq |\kappa|}}^{\mathbb{N}^*} (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) u_\kappa v_\kappa (\delta_{|\kappa|\kappa} \hat{c}_{-|\kappa|}^+ - \delta_{-|\kappa|\kappa} \hat{c}_{|\kappa|}^+) |\emptyset\rangle \\ + \prod_{\substack{\mu \\ \mu \neq |\kappa|}}^{\mathbb{N}^*} (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) (u_\kappa + v_\kappa \hat{c}_{|\kappa|}^+ \hat{c}_{-|\kappa|}^+) (u_\kappa \hat{c}_\kappa - \text{sgn } \kappa v_\kappa \hat{c}_{-\kappa}^+) |\emptyset\rangle \quad (\text{B3.13})$$

$$= \prod_{\substack{\mu \\ \mu \neq |\kappa|}}^{\mathbb{N}^*} (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) u_\kappa v_\kappa (\delta_{|\kappa|\kappa} \hat{c}_{-|\kappa|}^+ - \delta_{-|\kappa|\kappa} \hat{c}_{|\kappa|}^+) |\emptyset\rangle \\ - \prod_{\substack{\mu \\ \mu \neq |\kappa|}}^{\mathbb{N}^*} (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) (u_\kappa + v_\kappa \hat{c}_{|\kappa|}^+ \hat{c}_{-|\kappa|}^+) \text{sgn } \kappa v_\kappa \hat{c}_{-\kappa}^+ |\emptyset\rangle \quad (\text{B3.14})$$

$$= \prod_{\substack{\mu \\ \mu \neq |\kappa|}}^{\mathbb{N}^*} (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) u_\kappa v_\kappa (\delta_{|\kappa|\kappa} \hat{c}_{-|\kappa|}^+ - \delta_{-|\kappa|\kappa} \hat{c}_{|\kappa|}^+ - \text{sgn } \kappa \hat{c}_{-\kappa}^+) |\emptyset\rangle. \quad (\text{B3.15})$$

Or, si $\kappa > 0$ alors

$$\delta_{|\kappa|\kappa} \hat{c}_{-|\kappa|}^+ - \delta_{-|\kappa|\kappa} \hat{c}_{|\kappa|}^+ - \text{sgn } \kappa \hat{c}_{-\kappa}^+ = \hat{c}_{-\kappa}^+ - \hat{c}_{-\kappa}^+ = \hat{0} \quad (\text{B3.16})$$

et, si $\kappa < 0$ alors

$$\delta_{|\kappa|\kappa} \hat{c}_{-|\kappa|}^+ - \delta_{-|\kappa|\kappa} \hat{c}_{|\kappa|}^+ - \text{sgn } \kappa \hat{c}_{-\kappa}^+ = -\hat{c}_{-\kappa}^+ - (-\hat{c}_{-\kappa}^+) = \hat{0}. \quad (\text{B3.17})$$

Donc finalement

$$\hat{a}_\kappa |\Psi_0\rangle = \hat{0} |\Psi_0\rangle = 0. \quad (\text{B}_3.18)$$

Nous avons ainsi confirmé l'interprétation de l'état fondamental en tant que vide de quasi-particules. À partir de là, on peut montrer très rapidement que l'action d'un annihilateur de quasiparticule sur un état bloqué conduit aussi à zéro

$$\hat{a}_\kappa |\Psi_{0/\nu}\rangle = 0 \quad \text{si} \quad |\nu| \neq |\kappa|. \quad (\text{B}_3.19)$$

Pour résumer, nous avons obtenu les résultats suivants annoncés dans le théorème 17 p. 114 :

$$(3.3.23) \quad \hat{a}_\kappa |\Psi_0\rangle = 0,$$

$$(3.3.24) \quad \hat{a}_\kappa |\Psi_{0/\nu}\rangle = 0 \quad \text{si} \quad |\nu| \neq |\kappa|,$$

et dans le lemme 9 p. 115

$$(3.3.25) \quad \hat{a}_\kappa (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) = v_\mu u_\kappa (\delta_{\mu\kappa} \hat{c}_{-\mu}^+ - \delta_{-\mu\kappa} \hat{c}_\mu^+) + (u_\mu + v_\mu \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+) \hat{a}_\kappa,$$

$$(3.3.26) \quad \hat{a}_\kappa \left(\frac{\partial u_\mu}{\partial q^n} + \frac{\partial v_\mu}{\partial q^n} \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \right) = \frac{\partial v_\mu}{\partial q^n} u_\kappa (\delta_{\mu\kappa} \hat{c}_{-\mu}^+ - \delta_{-\mu\kappa} \hat{c}_\mu^+) + \left(\frac{\partial u_\mu}{\partial q^n} + \frac{\partial v_\mu}{\partial q^n} \hat{c}_\mu^+ \hat{c}_{-\mu}^+ \right) \hat{a}_\kappa.$$

Annexe C₃

Un résultat intermédiaire pour le calcul de

$$\langle \Psi_{\iota, \kappa} | \sum \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) | \Phi_k(q) \rangle$$

Nous prenons l'art dans l'état p. 116

$$(3.3.36) \quad \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) | \Phi_k(q) \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{a}_{-\iota} \hat{a}_{\iota} \left(\frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^n} + \frac{\partial v_{\iota}}{\partial q^n} \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \right) | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \delta_{-\iota \kappa}$$

et, avec la seconde équation du système (3.1.12) donné dans le théorème 13 p. 107,

$$\hat{a}_{-\iota} = u_{\iota} \hat{c}_{-\iota} + \text{sgn } \iota v_{\iota} \hat{c}_{\iota}^+ \quad (\text{C3.1})$$

et

$$\hat{a}_{\iota} = u_{\iota} \hat{c}_{\iota} - \text{sgn } \iota v_{\iota} \hat{c}_{-\iota}^+, \quad (\text{C3.2})$$

l'équation (3.3.36) devient

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) | \Phi_k(q) \rangle = \\ \langle \Psi_0 | (u_{\iota} \hat{c}_{-\iota} + \text{sgn } \iota v_{\iota} \hat{c}_{\iota}^+) (u_{\iota} \hat{c}_{\iota} - \text{sgn } \iota v_{\iota} \hat{c}_{-\iota}^+) \left(\frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^n} + \frac{\partial v_{\iota}}{\partial q^n} \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \right) | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \delta_{-\iota \kappa} \end{aligned} \quad (\text{C3.3})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^{\ell}} \langle \Psi_0 | (u_{\iota} \hat{c}_{-\iota} + \text{sgn } \iota v_{\iota} \hat{c}_{\iota}^+) (u_{\iota} \hat{c}_{\iota} - \text{sgn } \iota v_{\iota} \hat{c}_{-\iota}^+) | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \delta_{\kappa - \iota} \\ &+ \frac{\partial v_{\iota}}{\partial q^{\ell}} \langle \Psi_0 | (u_{\iota} \hat{c}_{-\iota} + \text{sgn } \iota v_{\iota} \hat{c}_{\iota}^+) (u_{\iota} \hat{c}_{\iota} - \text{sgn } \iota v_{\iota} \hat{c}_{-\iota}^+) \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \delta_{\kappa - \iota} \end{aligned} \quad (\text{C3.4})$$

$$\begin{aligned} &= -\text{sgn } \iota \frac{\partial u_{\iota}}{\partial q^{\ell}} v_{\iota} \langle \Psi_0 | (u_{\iota} \hat{c}_{-\iota} + \text{sgn } \iota v_{\iota} \hat{c}_{\iota}^+) \hat{c}_{-\iota}^+ | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \delta_{\kappa - \iota} \\ &+ \frac{\partial v_{\iota}}{\partial q^{\ell}} u_{\iota} \langle \Psi_0 | (u_{\iota} \hat{c}_{-\iota} + \text{sgn } \iota v_{\iota} \hat{c}_{\iota}^+) \hat{c}_{\iota} \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \delta_{\kappa - \iota} \end{aligned} \quad (\text{C3.5})$$

$$\begin{aligned}
&= -\operatorname{sgn} \iota \frac{\partial u_\iota}{\partial q^\ell} v_\iota \langle \Psi_0 | u_\iota \hat{c}_{-\iota} \hat{c}_{-\iota}^+ + \operatorname{sgn} \iota v_\iota \hat{c}_\iota^+ \hat{c}_{-\iota}^+ | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \delta_{\kappa-\iota} \\
&+ \frac{\partial v_\iota}{\partial q^\ell} u_\iota \langle \Psi_0 | u_\iota \hat{c}_{-\iota} \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-\iota}^+ + \operatorname{sgn} \iota v_\iota \hat{c}_\iota^+ \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-\iota}^+ | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \delta_{\kappa-\iota}. \quad (\text{C3.6})
\end{aligned}$$

Or,

$$\operatorname{sgn} \iota \hat{c}_\iota^+ \hat{c}_{-\iota}^+ = \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+, \quad (\text{C3.7})$$

donc

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{\iota,\kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) | \Phi_k(q) \rangle &= -\operatorname{sgn} \iota \frac{\partial u_\iota}{\partial q^\ell} v_\iota \langle \Psi_0 | u_\iota + v_\iota \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \delta_{\kappa-\iota} + \frac{\partial v_\iota}{\partial q^\ell} u_\iota \delta_{\kappa-\iota} \\
&\times \langle \Psi_0 | u_\iota \hat{c}_{-\iota} \hat{c}_{-|\iota|}^+ \delta_{\iota|\iota|} - u_\iota \hat{c}_{-\iota} \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-\iota}^+ + \operatorname{sgn} \iota v_\iota \hat{c}_\iota^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \delta_{\iota|\iota|} - \operatorname{sgn} \iota v_\iota \hat{c}_\iota^+ \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-\iota}^+ | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \quad (\text{C3.8})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\operatorname{sgn} \iota \frac{\partial u_\iota}{\partial q^\ell} v_\iota \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \delta_{\kappa-\iota} + \frac{\partial v_\iota}{\partial q^\ell} u_\iota \delta_{\kappa-\iota} \\
&\times \langle \Psi_0 | u_\iota \delta_{\iota|\iota|} - u_\iota \hat{c}_{-\iota} \hat{c}_{|\iota|}^+ \delta_{\iota-|\iota|} + \operatorname{sgn} \iota v_\iota \hat{c}_\iota^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \delta_{\iota|\iota|} - \operatorname{sgn} \iota v_\iota \hat{c}_\iota^+ \hat{c}_{|\iota|}^+ \delta_{\iota-|\iota|} | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \quad (\text{C3.9})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\operatorname{sgn} \iota \frac{\partial u_\iota}{\partial q^\ell} v_\iota \delta_{\kappa-\iota} + \frac{\partial v_\iota}{\partial q^\ell} u_\iota \delta_{\kappa-\iota} \\
&\times \langle \Psi_0 | u_\iota \delta_{\iota|\iota|} + \operatorname{sgn} \iota v_\iota \hat{c}_\iota^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \delta_{\iota|\iota|} - u_\iota \delta_{\iota-|\iota|} - \operatorname{sgn} \iota v_\iota \hat{c}_\iota^+ \hat{c}_{|\iota|}^+ \delta_{\iota-|\iota|} | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \quad (\text{C3.10})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\operatorname{sgn} \iota \frac{\partial u_\iota}{\partial q^\ell} v_\iota \delta_{\kappa-\iota} + \frac{\partial v_\iota}{\partial q^\ell} u_\iota \delta_{\kappa-\iota} \\
&\times \langle \Psi_0 | u_\iota \delta_{\iota|\iota|} + v_\iota \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \delta_{\iota|\iota|} - u_\iota \delta_{\iota-|\iota|} + \operatorname{sgn} \iota v_\iota \hat{c}_\iota^+ \hat{c}_{|\iota|}^+ \delta_{\iota-|\iota|} | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \quad (\text{C3.11})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\operatorname{sgn} \iota \frac{\partial u_\iota}{\partial q^\ell} v_\iota \delta_{\kappa-\iota} + \frac{\partial v_\iota}{\partial q^\ell} u_\iota \delta_{\kappa-\iota} \\
&\times \langle \Psi_0 | \left(u_\iota + v_\iota \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \right) \operatorname{sgn} \iota \delta_{\iota|\iota|} + \left(u_\iota + v_\iota \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \right) \operatorname{sgn} \iota \delta_{\iota-|\iota|} | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \quad (\text{C3.12})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\operatorname{sgn} \iota \frac{\partial u_\iota}{\partial q^\ell} v_\iota \delta_{\kappa-\iota} + \frac{\partial v_\iota}{\partial q^\ell} u_\iota \delta_{\kappa-\iota} \\
&\times \langle \Psi_0 | \left(u_\iota + v_\iota \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \right) \operatorname{sgn} \iota \delta_{\iota|\iota|} + \left(u_\iota + v_\iota \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \right) \operatorname{sgn} \iota \delta_{\iota-|\iota|} | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \quad (\text{C3.13})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\operatorname{sgn} \iota \frac{\partial u_\iota}{\partial q^\ell} v_\iota \delta_{\kappa-\iota} + \operatorname{sgn} \iota \frac{\partial v_\iota}{\partial q^\ell} u_\iota \langle \Psi_0 | \left(u_\iota + v_\iota \hat{c}_{|\iota|}^+ \hat{c}_{-|\iota|}^+ \right) | \Psi_{0/|\iota|} \rangle \delta_{\kappa-\iota} \quad (\text{C3.14})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\operatorname{sgn} \iota \frac{\partial u_\iota}{\partial q^\ell} v_\iota \delta_{\kappa-\iota} + \operatorname{sgn} \iota \frac{\partial v_\iota}{\partial q^\ell} u_\iota \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \delta_{\kappa-\iota}, \quad (\text{C3.15})
\end{aligned}$$

et nous trouvons le résultat annoncé p. 116 :

$$(3.3.37) \quad \langle \Psi_{\iota, \kappa} | \sum_k^{\mathbb{N}} \frac{\partial f_k}{\partial q^n}(q) | \Phi_k(q) \rangle = \text{sgn } \iota \left(\frac{\partial v_\iota}{\partial q^n} u_\iota - \frac{\partial u_\iota}{\partial q^n} v_\iota \right) \delta_{-\iota \kappa}.$$

Annexe D₃

Le théorème de HELLMANN-FEYNMAN-EPSTEIN

Soit un hamiltonien qui dépend de paramètres continus q^n dont le spectre est discret et les valeurs propres et états propres tels que

$$\hat{H}(\hat{x}; q) |\psi_\mu(q)\rangle = e_\mu(q) |\psi_\mu(q)\rangle \quad (\text{D}_3.1)$$

et

$$\langle \psi_\nu(q) | \psi_\mu(q) \rangle = \delta_{\nu\mu}. \quad (\text{D}_3.2)$$

Nous effectuons une petite variation d'un seul paramètre à la fois passant de q^n en $q^n + dq^n$. Alors les variations au premier ordre sont

$$|\psi_\mu(\dots, q^n + dq^n, \dots)\rangle = |\psi_\mu(q)\rangle + |d\psi_\mu(q)\rangle, \quad (\text{D}_3.3)$$

$$\hat{H}(\hat{x}; \dots, q^n + dq^n, \dots) = \hat{H}(\hat{x}; q) + d\hat{H}(\hat{x}; q), \quad (\text{D}_3.4)$$

$$e_\mu(\dots, q^n + dq^n, \dots) = e_\mu(q) + de_\mu(q), \quad (\text{D}_3.5)$$

avec

$$\hat{H}(\hat{x}; \dots, q^n + dq^n, \dots) |\psi_\mu(\dots, q^n + dq^n, \dots)\rangle = e_\mu(\dots, q^n + dq^n, \dots) |\psi_\mu(\dots, q^n + dq^n, \dots)\rangle \quad (\text{D}_3.6)$$

et

$$\langle \psi_\nu(\dots, q^n + dq^n, \dots) | \psi_\mu(\dots, q^n + dq^n, \dots) \rangle = \delta_{\nu\mu}. \quad (\text{D}_3.7)$$

Si nous développons ces deux dernières égalités à partir des variations au premier ordre et que nous négligeons les termes au-delà du premier ordre, alors

$$d\hat{H}(\hat{x}; q) |\psi_\mu(q)\rangle + \hat{H}(\hat{x}; q) |d\psi_\mu(q)\rangle = de_\mu(q) |\psi_\mu(q)\rangle + e_\mu(q) |d\psi_\mu(q)\rangle \quad (\text{D}_3.8)$$

et

$$\langle d\psi_\nu(q) | \psi_\mu(q) \rangle + \langle \psi_\nu(q) | d\psi_\mu(q) \rangle = 0. \quad (\text{D}_3.9)$$

Effectuons maintenant le produit scalaire au sens de DIRAC de $|\psi_\nu(q)\rangle$ avec l'équation (D_{3.8}) :

$$\langle \psi_\nu(q) | d\hat{H}(\hat{x}; q) | \psi_\mu(q) \rangle + \langle \psi_\nu(q) | \hat{H}(\hat{x}; q) | d\psi_\mu(q) \rangle = de_\mu(q) \langle \psi_\nu(q) | \psi_\mu(q) \rangle$$

$$+ e_\mu(q) \langle \psi_\nu(q) | d\psi_\mu(q) \rangle, \quad (\text{D}_3.10)$$

soit

$$\langle \psi_\nu(q) | d\hat{H}(\hat{x}; q) | \psi_\mu(q) \rangle + e_\nu(q) \langle \psi_\nu(q) | d\psi_\mu(q) \rangle = de_\mu(q) \delta_{\nu\mu} + e_\mu(q) \langle \psi_\nu(q) | d\psi_\mu(q) \rangle, \quad (\text{D}_3.11)$$

donc

$$de_\mu(q) \delta_{\nu\mu} = \langle \psi_\nu(q) | d\hat{H}(\hat{x}; q) | \psi_\mu(q) \rangle + [e_\nu(q) - e_\mu(q)] \langle \psi_\nu(q) | d\psi_\mu(q) \rangle. \quad (\text{D}_3.12)$$

En considérant la limite lorsque $dq^n \rightarrow 0$, nous avons

$$de_\mu(q) = \frac{\partial e_\mu}{\partial q^n}(q) dq^n, \quad (\text{D}_3.13)$$

$$d\hat{H}(\hat{x}; q) = \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n}(\hat{x}; q) dq^n, \quad (\text{D}_3.14)$$

$$d\psi_\mu(q) = \frac{\partial \psi_\mu}{\partial q^n} dq^n, \quad (\text{D}_3.15)$$

et comme

$$\left| \frac{\partial \psi_\mu}{\partial q^n}(q) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial q^n} |\psi_\mu(q)\rangle, \quad (\text{D}_3.16)$$

donc

$$\frac{\partial e_\mu}{\partial q^n}(q) dq^n \delta_{\nu\mu} = \langle \psi_\nu(q) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n}(\hat{x}; q) | \psi_\mu(q) \rangle dq^n + [e_\nu(q) - e_\mu(q)] \langle \psi_\nu(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} |\psi_\mu(q)\rangle dq^n. \quad (\text{D}_3.17)$$

Alors en simplifiant par dq^n dans l'équation (D3.17), nous trouvons

$$\frac{\partial e_\mu}{\partial q^n}(q) \delta_{\nu\mu} = \langle \psi_\nu(q) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n}(\hat{x}; q) | \psi_\mu(q) \rangle + [e_\mu(q) - e_\nu(q)] \langle \psi_\nu(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} |\psi_\mu(q)\rangle, \quad (\text{D}_3.18)$$

que nous réarrangeons pour obtenir le résultat énoncé dans le théorème 18 p. 121

$$(3.3.96) \quad \langle \psi_\nu(q) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q^n}(\hat{x}; q) | \psi_\mu(q) \rangle = \frac{\partial e_\mu}{\partial q^n}(q) \delta_{\nu\mu} - [e_\mu(q) - e_\nu(q)] \langle \psi_\nu(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} |\psi_\mu(q)\rangle.$$

Des extensions de ce théorème sont présentées dans [25] (bibliographie p. 145).


Bibliographie du chapitre 3

- [22] P. RING & P. SCHUCK, « The Nuclear Many-Body Problem », Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1980.
- [23] M. BRACK, J. DAMGAARD, A. S. JENSEN, H. C. PAULI, V. M. STRUTINSKY & C. Y. WONG, « Funny Hills : The Shell-Correction Approach to Nuclear Shell Effects and Its Application to the Fission Process », Review of Modern Physics, Vol. 44, Publ. 2, 1972, pp. 320-405.
- [24] S. T. BELYAEV, « Effect of Pairing Correlations on Nuclear Properties », Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **31**, no. 11, 1959.
- [25] O. L. DE LANGE & R. E. RAAB « Operator Methods in Quantum Mechanics », Oxford Science Publications, New York, 1991.
- [26] D. BÈS, « A Study of Nuclear Potential Energy Surfaces and Gamma Vibrations », Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **33**, no. 2, 1961.
- [27] M. BARANGER & K. KUMAR, « Nuclear Deformations in the Pairing-Plus-Quadrupole Model », Nuclear Physics **A122**, 1968, pp. 241-272.

« Należę do tych którzy sądzą, że wiedza charakteryzuje się niezwykłym pięknem. Naukowiec w swojej pracowni to nie tylko pracownik - on jest trochę jak dziecko dotykające zjawisk natury które je fascynują jak baśń. » †
Maria SKŁODOWSKA-CURIE

Chapitre 4

Expression des symétries de haut rang dans quelques situations concrètes

ANS LE cadre de cette thèse, nous avons construit deux programmes WS_ODD et SE_COL. Le premier calcule microscopiquement le tenseur de masse et le second résout l'équation de SCHRÖDINGER avec le tenseur de masse tout juste calculé. Dans ce chapitre, nous donnons des résultats de la théorie microscopique du tenseur de masse que nous venons de construire. Nous nous limitons à des exemples qui illustrent une grande richesse en nous focalisant sur les aspects particulièrement nouveaux de ce travail. Tout d'abord, dans la première section, nous envisageons une première utilisation possible de la symétrie icosaédrique (ou d'une symétrie d'ordre 5) dans le cas du ^{256}Rf . Dans les sections suivantes, nous nous concentrons sur la symétrie tétraédrique dans les cas de ^{80}Zr , de ^{96}Zr et de ^{110}Zr . Dans la deuxième et la troisième section, nous intéressons à l'effet de la symétrie sur la formation de grands sauts d'énergie (en anglais *gap*) et nous montrons la coexistence de transition de phase BCS et de comportements anomaux du tenseur de masse sous la forme d'augmentations très importantes de la valeur du tenseur pour certaines déformations. La quatrième section aborde les idées mises en œuvre pour l'interprétation des résultats des calculs. La cinquième section montre l'interprétation de l'inertie collective. Enfin la sixième section ébauche l'étude de l'influence de la quantité τ qui discerne conceptuellement le problème important sur l'existence de deux échelles de durée. Cette quantité τ doit d'une part permettre d'étalonner la théorie par une confrontation à l'expérience ou, dit autrement, l'expérience va permettre de déterminer τ (toutefois il ne s'agit pas de choisir systématiquement τ à sa guise pour faire en sorte que la théorie concorde avec toute expérience); et d'autre part dans la limite de τ asymptotique, la fonction \aleph prend une valeur constante correspondant au facteur 2 recherché depuis des années à propos du tenseur de masse [9] (bibliographie p. 43).

†. « Je suis de ceux qui pensent que la science a une grande beauté. Un savant dans son laboratoire n'est pas seulement un technicien : c'est aussi un enfant placé en face de phénomènes naturels qui l'impressionnent comme un conte de fées. »

4.1 Le nucléide ^{256}Rf et la déformation icosaédrique

LE GROUPE de symétries de l'icosaèdre peut paraître un peu fantaisiste, mais il pourrait être prudent de ne pas l'écarter totalement. En effet, l'étude expérimentale du noyau de rutherfordium 256, par l'équipe du Professeur Benoît GALL et ses collaborateurs, a conduit à la mise en évidence de sa déformation quadrupolaire axiale et à l'existence probable de trois isomères K ([28] et [29] bibliographie p. 175). Nous avons mené quelques calculs avec notre programme WS_ODD pour aider à l'interprétation des résultats expérimentaux de ce noyau, et nous avons pu vérifier que les déformations tétrahexacontapolaires, c'est-à-dire α_6^0 , ne sont probablement pas insignifiantes pour ce noyau, alors que les déformations hexadécapolaires, c'est-à-dire α_4^0 , semblent être absentes. Les figures 4.1 et 4.2 p. 149 montrent l'existence d'un minimum d'énergie

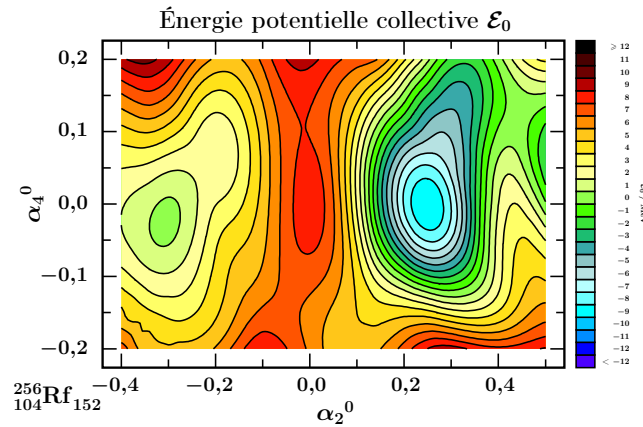


Figure 4.1 – Énergie totale en fonction de la déformation quadrupolaire axiale et de la déformation hexadécapolaire axiale

du noyau pour une déformation quadrupolaire axiale $\alpha_2^0 = 0,25$ et $\alpha_4^0 = 0,0$ avec, soit la déformation tétrahexacontapolaire axiale $\alpha_6^0 = -0,06$, soit la déformation icosaédrique $i_1 = -0,03$ avec par définition :

$$i_1 \equiv \alpha_6^0 \quad \text{avec} \quad \alpha_6^5 = -\sqrt{\frac{7}{11}}\alpha_6^0. \quad (4.1.1)$$

Aucun effet de la déformation hexadécapolaire, c'est-à-dire α_4^0 , n'est donc à prévoir. Initialement nous avons considéré uniquement la déformation tétrahexacontapolaire axiale, c'est-à-dire α_6^0 . Mais nous avons récemment obtenu les contraintes de forme pour l'icosaèdre et le dodécaèdre. En voyant l'intervention de α_6^0 dans ces contraintes, nous avons donc repris les anciens calculs dans ce nouveau contexte. Le noyau de rutherfordium n'est évidemment pas purement dodécaédrique, mais il pourrait avoir la forme d'un « dodécaèdre allongé » suivant l'un de ses axes d'ordre 5 comme sur la figure 4.3 p. 149. Il est important de rappeler que le groupe icosaédrique engendre des dégénérescences jusqu'au degré 6 et que par ailleurs le tenseur de masse associé à cette géométrie est particulièrement renforcé par l'existence de la liaison entre les coordonnées de forme α_6^0 et α_6^5 . Cela laisse envisager un fort impact de ces déformations sur le mouvement

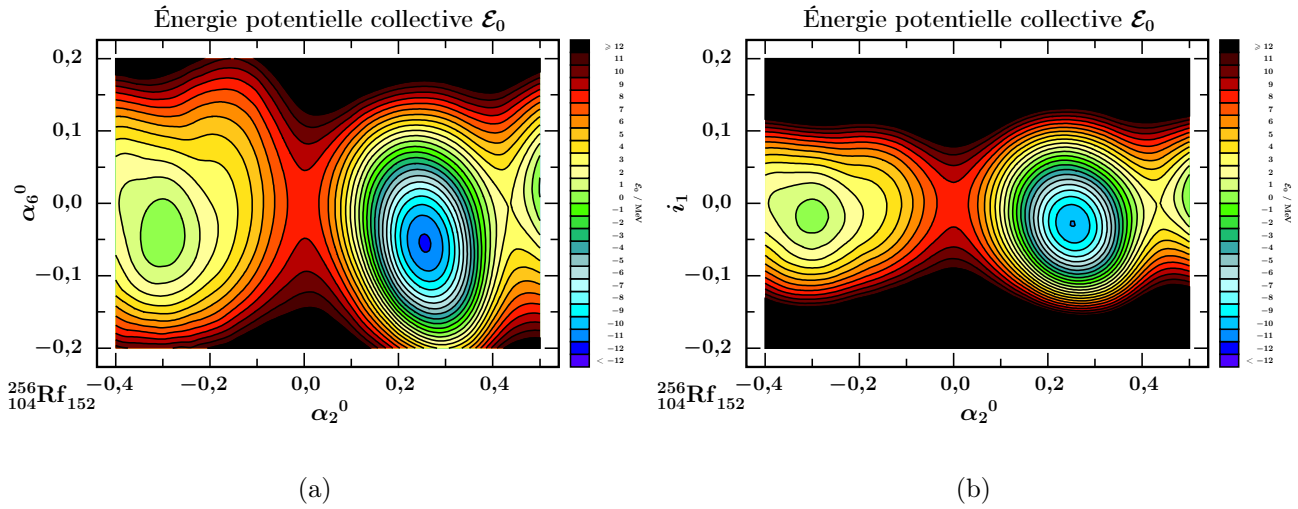


Figure 4.2 – Énergie totale en fonction de la déformation quadrupolaire axiale et de la déformation α_6^0 (a) ou icosaédrique (b)



Figure 4.3 – Forme possible du noyau de ^{256}Rf vu sous deux angles

collectif des noyaux superlourds, mouvement collectif dont la détermination numérique par la résolution de l'équation de SCHRÖDINGER collective est en bonne voie.

Les isomères K auxquels nous sommes susceptibles d'apporter immédiatement une interprétation et une aide dans l'assignation de la projection K du moment cinétique et de la parité sont ceux de la ligne *yrast*. Nous pouvons considérer, en première approximation, qu'ils sont dus à une excitation à deux quasiparticules. Les figures 4.4 p. 152, 4.5 p. 153 et 4.6 p. 154 montrent les énergies de particules individuelles en fonction de la déformation quadrupolaire axiale. Elles correspondent à trois hypothèses sur la minimisation de l'énergie totale :

- pas de minimisation et minimum minimorum obtenu pour $\alpha_2^0 = 0,247$, figure 4.4 p. 152 ;
- minimisation sur α_6^0 et minimum minimorum obtenu pour $\alpha_2^0 = 0,249$ et $\alpha_6^0 = -0,039$, figure 4.5 p. 153 ;
- minimisation sur i_1 et minimum minimorum obtenu pour $\alpha_2^0 = 0,245$ et $i_1 = -0,044$, figure 4.6 p. 154.

À déformation nulle, l'ordre des niveaux est identique, pour les trois calculs. À déformation

non nulle, les dégénérescences des niveaux sphériques sont levées et les multiplets se séparent en fonction de la déformation présente. Il faut noter que, si la dégénérescence $2j + 1$ pour les états sphériques a été levée, la dégénérescence de KRAMERS, égale à 2, persiste. De cette manière, les *gaps* sphériques se ferment et de nouveaux *gaps* apparaissent à des déformations importantes, correspondant à de nouveaux nombres « magiques » déformés. Ainsi pour le ^{256}Rf , la minimisation de l'énergie totale sur la seule déformation quadrupolaire axiale donne, sur la figure 4.4 p. 152, un gap pour $Z = 104$ et $A - Z = 152$ avec $\alpha_2^0 = 0,247$. Avec la minimisation supplémentaire sur α_6^0 ou sur i_1 , nous trouvons toujours une déformation α_2^0 similaire mais le gap $Z = 104$ est quasiment fermé au profit de l'ouverture du gap $Z = 102$ (voir [28] bibliographie p. 175) comme nous le voyons sur les figures 4.5 p. 153 et 4.6 p. 154.

Pour faciliter le dialogue avec les expérimentateurs, nous utilisons la notation asymptotique de NILSSON $[Nn_z\Lambda]\Omega^\pi$ pour étiqueter les états. Dans cette notation, N est le nombre quantique principal, n_z est le nombre de nœuds le long de l'axe z (axe de déformation et de projection des moments cinétiques), Λ est la projection du moment cinétique orbital, $\Omega = \Lambda \pm \frac{1}{2}$ est la projection totale et π est la parité. Dans les diagrammes, nous repérons les états de parité positive en trait plein, les états de parité négative en traitillé et le niveau de FERMI, λ , en pointillé.

Les états isomériques d'un noyau sont considérés comme des excitations de l'état fondamental avec deux quasiparticules. Les états choisis pour l'excitation à deux quasiparticules ont une projection Ω du moment cinétique définie. La valeur de K pour l'état à deux quasiparticules ne peut donc prendre que deux valeurs pour $K = |\Omega_1 \pm \Omega_2|$. L'énergie de l'état isomérique est la somme des énergies des deux quasiparticules :

$$E_{\text{isomère}} = \sqrt{(e_1 - \lambda)^2 + \Delta^2} + \sqrt{(e_2 - \lambda)^2 + \Delta^2}. \quad (4.1.2)$$

Nous utilisons des paires d'énergies de particules individuelles proche du niveau de FERMI et les deux états $K = |\Omega_1 \pm \Omega_2|$ sont dégénérés. Sous l'effet d'une interaction résiduelle, non prise en compte dans notre théorie, la dégénérescence de ces états à deux quasiparticules se lève. Expérimentalement, on constate la levée de cette dégénérescence pour les projections

$$K = |\Omega_1 \pm \Omega_2|. \quad (4.1.3)$$

Les règles empiriques de GALLAGHER ([30] bibliographie p. 175) permettent de prévoir la projection K et la parité totale π de l'état à une particule et un trou de plus basse énergie :

- comme d'habitude, la parité totale est le produit des deux parités : $\pi = \pi_1 \times \pi_2$;
- la projection K est la somme ou la différence des moments cinétiques totaux :
 $K = |\Omega_1 \pm \Omega_2|$;
- si $\Omega_1 = \Lambda_1 \pm \frac{1}{2}$ et $\Omega_2 = \Lambda_2 \mp \frac{1}{2}$, la projection favorisée est $K = \Omega_1 + \Omega_2$, et la projection défavorisée est $K = |\Omega_1 - \Omega_2|$;
- si $\Omega_1 = \Lambda_1 \pm \frac{1}{2}$ et $\Omega_2 = \Lambda_2 \pm \frac{1}{2}$, la projection favorisée est $K = |\Omega_1 - \Omega_2|$, et la projection défavorisée est $K = \Omega_1 + \Omega_2$.

La levée de dégénérescence est assez faible, cela nous autorise à envisager des états favorisés et défavorisés de GALLAGHER qui présentent des projections K parfois très importantes.

Donnons deux exemples d'application de ces règles. Pour l'état à un neutron $[725]11/2^-$ et un trou $[734]9/2^-$, nous trouvons $\pi = (-1) \times (-1) = 1$; $\Omega_1 = \frac{11}{2} = 5 + \frac{1}{2}$ et $\Omega_2 = \frac{9}{2} = 4 + \frac{1}{2}$ donc $K = \frac{11}{2} - \frac{9}{2} = 1$ pour l'état favorisé et $K = \frac{11}{2} + \frac{9}{2} = 10$ pour l'état défavorisé ; finalement il

s'agit d'un état 1^+ ou 10^+ . Le tableau 4.1 résume quelques possibilités d'états à un neutron et un trou qui pourraient expliquer les isomères K du ^{256}Rf .

Niveaux décroissants de trou	Niveaux croissants de neutron			
	[613]7/2 ⁺	[620]1/2 ⁺	[725]11/2 ⁻	[622]3/2 ⁺
[624]7/2 ⁺	7 ⁺ /0 ⁺	4 ⁺ /3 ⁺	9 ⁻ /2 ⁻	2 ⁺ /5 ⁺
[734]9/2 ⁻	1 ⁻ /8 ⁻	4 ⁻ /5 ⁻	1 ⁺ /10 ⁺	6 ⁻ /3 ⁻
[622]5/2 ⁺	1 ⁺ /6 ⁺	2 ⁺ /3 ⁺	3 ⁻ /8 ⁻	4 ⁺ /1 ⁺

Tableau 4.1 – K^π d'excitations à un neutron et un trou; l'état favorisé selon les règles de GALLAGHER est donné en premier, et l'état défavorisé est donné en second et écrit plus petit

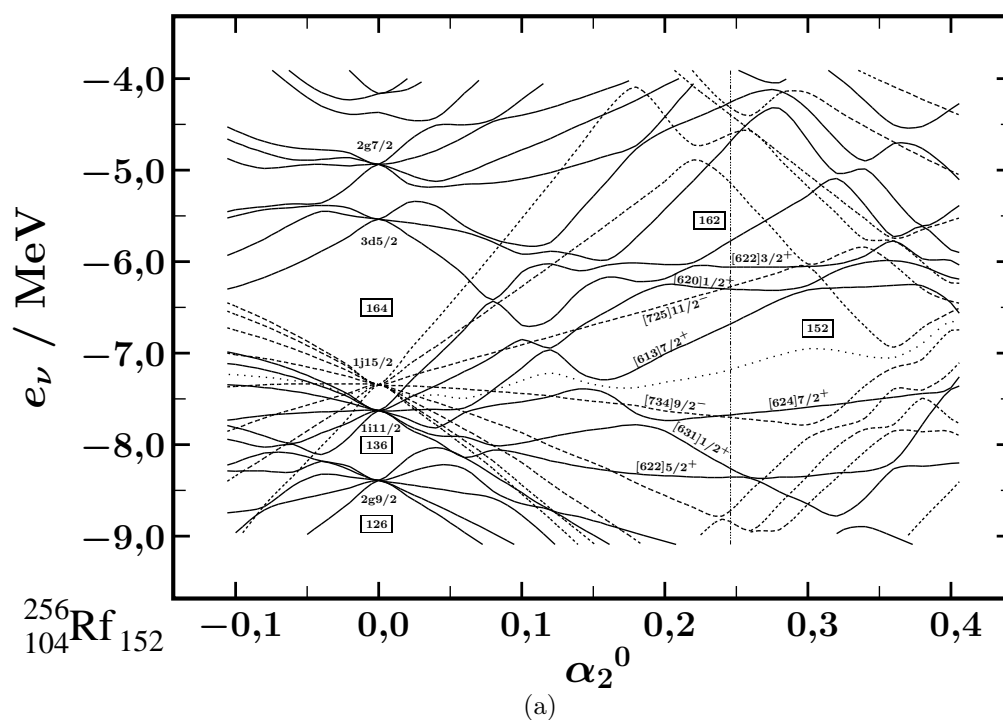
Pour l'état à un proton [624]9/2⁺ et un trou [514]7/2⁻, nous trouvons $\pi = 1 \times (-1) = -1$; $\Omega_1 = \frac{9}{2} = 4 + \frac{1}{2}$ et $\Omega_2 = \frac{7}{2} = 4 - \frac{1}{2}$ donc $K = \frac{9}{2} + \frac{7}{2} = 8$ pour l'état favorisé et $K = \frac{9}{2} - \frac{7}{2} = 1$ pour l'état défavorisé; finalement il s'agit d'un état 8^- ou 1^- . Le tableau 4.2 résume quelques possibilités d'états à un proton et un trou qui pourraient expliquer les isomères K du ^{256}Rf .

Niveaux décroissants de trou	Niveaux croissants de proton	
	[624]9/2 ⁺	[512]5/2 ⁻
[514]7/2 ⁻	8 ⁻ /1 ⁻	6 ⁺ /1 ⁺
[521]1/2 ⁻	5 ⁻ /4 ⁻	3 ⁺ /2 ⁺

Tableau 4.2 – K^π d'excitations à un proton et un trou; l'état favorisé selon les règles de GALLAGHER est donné en premier, et l'état défavorisé est donné en second et écrit plus petit

Nous pouvons ajouter que seules des valeurs de K supérieures à 2 sont susceptibles de produire des isomères. En effet, les études systématiques des isomères dans [31] (bibliographie p. 175) montrent que, dans ce cas, les transitions électromagnétiques sont fortement amoindries. Cela confère à l'état une demi-vie assez longue, c'est-à-dire une interdiction très forte de transition. Il est alors nécessaire d'avoir entre les isomères et les structures intermédiaires des variations importantes de la projection K . Nous retrouvons quelques solutions possibles dans les tableaux 4.1 et 4.2. Ces isomères K sont très bien observés par les expérimentateurs. Ils jouent ainsi le rôle de véritables chandelles dans le dialogue entre théorie et expérience, ce qui explique notre intérêt pour eux. Les résultats expérimentaux apporteront dans la suite une contrainte très forte pour la théorie, ce dont nous nous réjouissons.

Énergies de neutrons individuels



Énergies de protons individuels

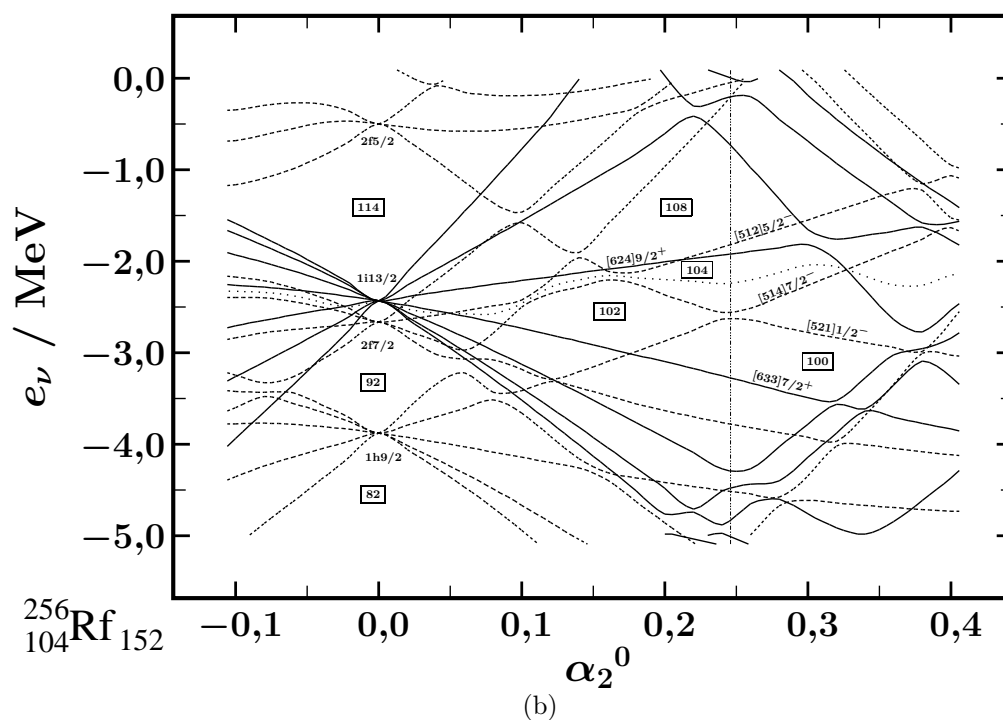
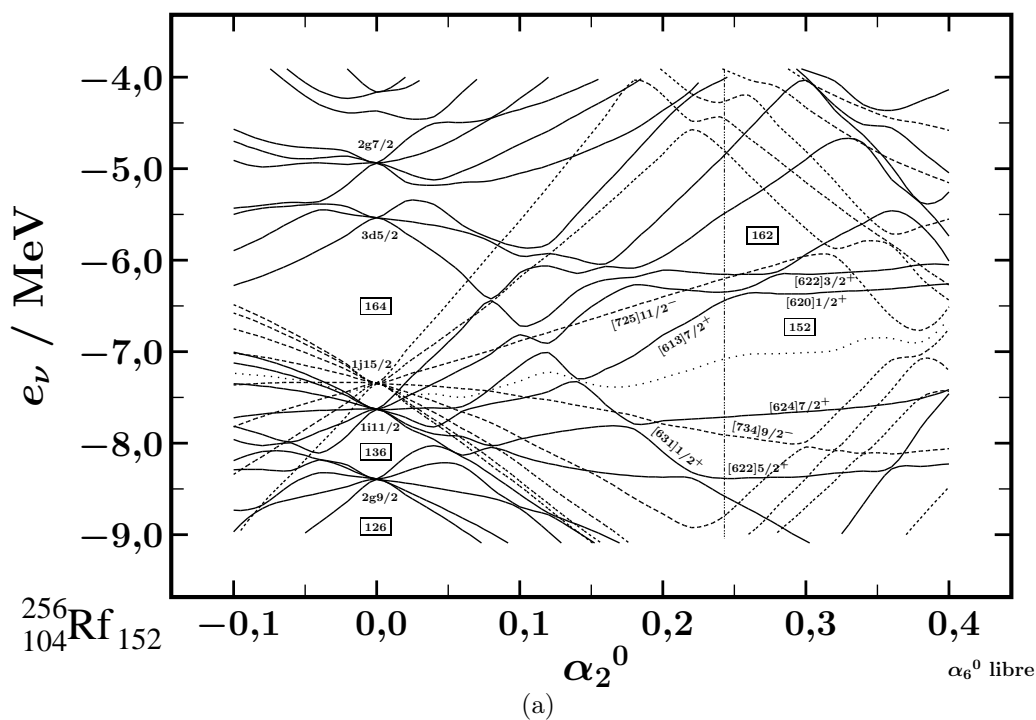


Figure 4.4 – Niveaux d'énergie des neutrons (a) ou des protons (b) individuels en fonction de la déformation quadrupolaire axiale; en trait plein, les niveaux de parité positive; en traitillé, les niveaux de parité négative; en pointillé, le niveau de FERMÍ

Énergies de neutrons individuels



Énergies de protons individuels

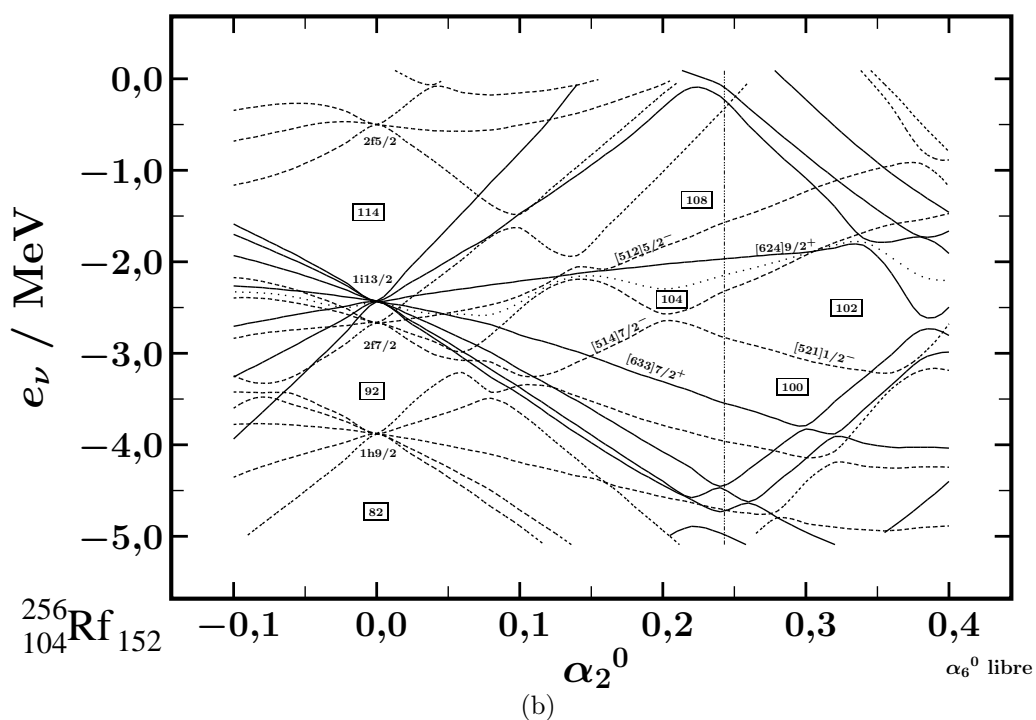
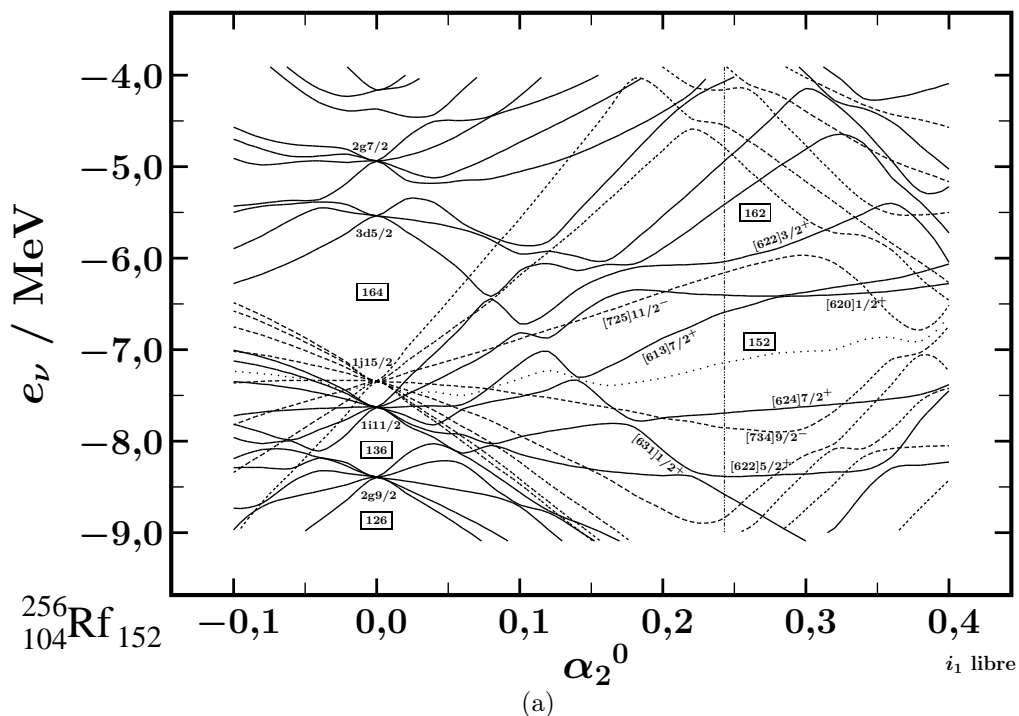


Figure 4.5 – Niveaux d'énergie des neutrons (a) ou des protons (b) individuels en fonction de la déformation quadrupolaire axiale avec la minimisation de l'énergie totale sur α_6^0 ; en trait plein, les niveaux de parité positive; en traitillé, les niveaux de parité négative; en pointillé, le niveau de FERMI

Énergies de neutrons individuels



Énergies de protons individuels

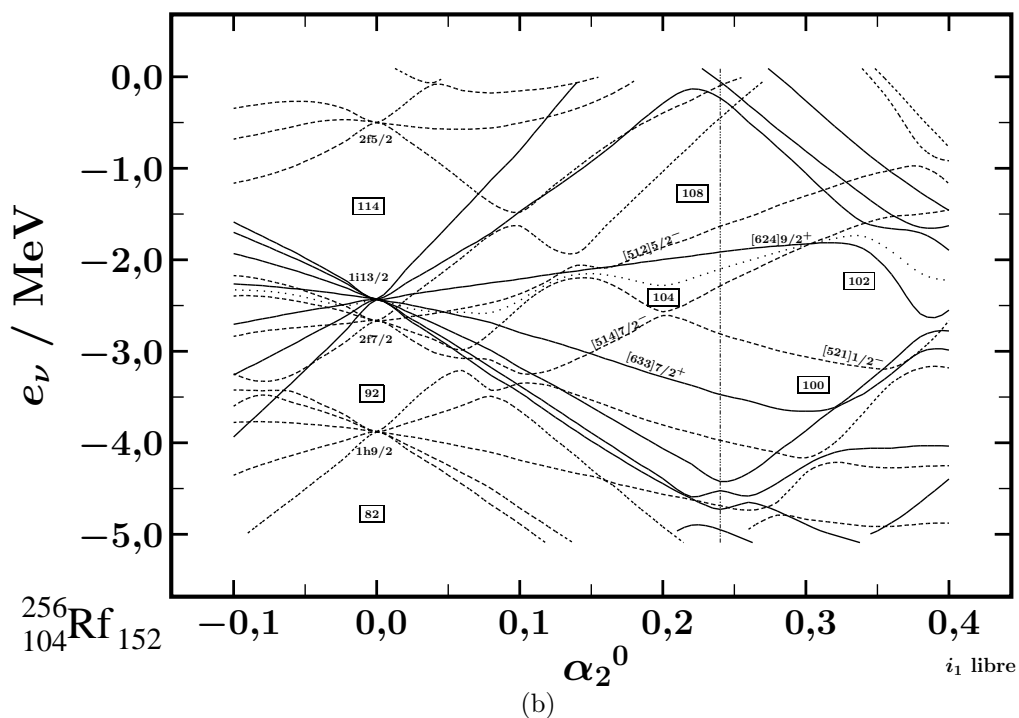


Figure 4.6 – Niveaux d'énergie des neutrons (a) ou des protons (b) individuels en fonction de la déformation quadrupolaire axiale avec la minimisation de l'énergie totale sur i_1 ; en trait plein, les niveaux de parité positive; en traitillé, les niveaux de parité négative; en pointillé, le niveau de FERMI

4.2 L'apparition des gaps tétraédriques

À TITRE d'exemple, nous avons calculé les noyaux de zirconium 80, 96 et 110. Pour ces noyaux, nous avons considéré les coordonnées de formes prolate/oblate α_2^0 et tétraédrique α_3^2 . Les figures 4.7 p. 156 , 4.8 p. 157 et 4.9 p. 158 montrent l'énergie dite *de couche de STRUTINSKY*, d'une part pour les neutrons et d'autre part pour les protons. D'après Vilen STRUTINSKY, l'énergie du noyau peut être approximée par la relation

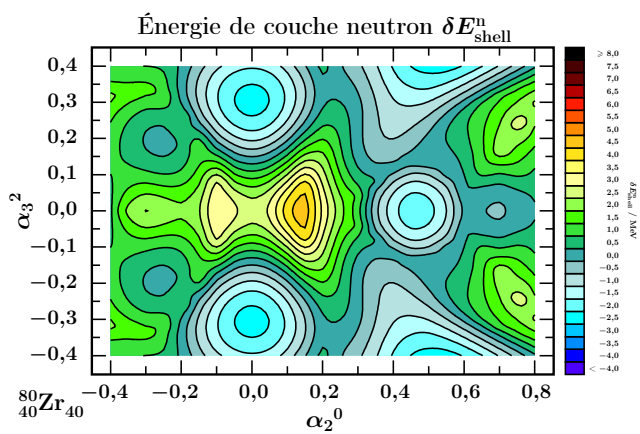
$$E_{\text{tot}}(\alpha) = E_{\text{LD}}(\alpha) + \delta E_{\text{shell}}^{\text{p}}(\alpha) + \delta E_{\text{shell}}^{\text{n}}(\alpha) + \delta E_{\text{pair}}^{\text{p}}(\alpha) + \delta E_{\text{pair}}^{\text{n}}(\alpha), \quad (4.2.1)$$

où E_{LD} est l'énergie de la goutte liquide et δE_{shell} et δE_{pair} sont les corrections énergétiques apportées par STRUTINSKY. Nous calculons ces deux corrections mais nous allons nous intéresser d'abord à δE_{shell} , qui est plus importante afin de simplifier les arguments. Il est connu que cette énergie de couche δE_{shell} prend des valeurs négatives lorsque des sauts d'énergie apparaissent dans la structure en couche des niveaux d'énergie des particules individuelles. Dans le cas du ^{80}Zr , figure 4.7 p. 156, l'énergie de couche (proton ou neutron) présente trois minima pour $(\alpha_2^0 \approx 0,5 ; \alpha_3^2 = 0,0)$ et $(\alpha_2^0 = 0,0 ; \alpha_3^2 \approx \pm 0,3)$. Dans le cas du ^{96}Zr , figure 4.8 p. 157, et celui du ^{110}Zr , figure 4.9 p. 158, l'énergie de couche présente plutôt deux minima tétraédriques pour $(\alpha_2^0 = 0,0 ; \alpha_3^2 \approx \pm 0,3)$. Subséquemment, nous comprenons qu'il existe de grands sauts d'énergie stabilisant la structure nucléaire pour ces déformations. Cela montre que la symétrie tétraédrique provoque ces sauts d'énergie qui sont comparables à ceux obtenus avec le nombre magique $N = 50$ pour les noyaux sphériques.

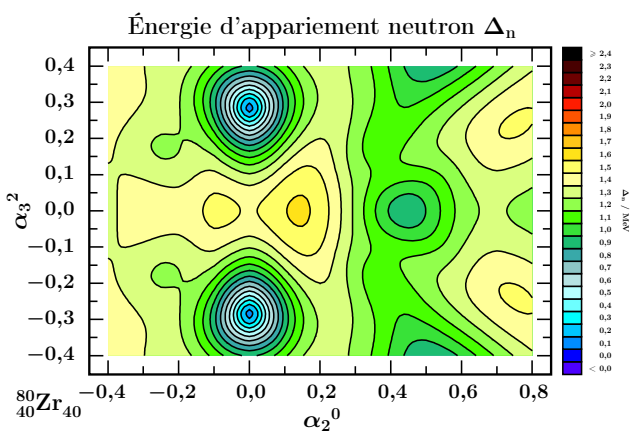
En effectuant une confrontation avec les énergies d'appariement Δ , nous voyons que cette énergie Δ présente des minima aux mêmes endroits que l'énergie de couche. Néanmoins les minima tétraédriques sont plus prononcés. Cela ne se produit pas par hasard comme nous allons l'expliquer. De tels minima sont la signature d'un défaut de la théorie BCS pour ces déformations, défaut lié à une transition de phase de l'appariement. Ce défaut de la théorie BCS, ainsi que l'apparition de ces minima dans l'énergie d'appariement, sont assez bien compris en reprenant l'une des équations de la théorie

$$\frac{2}{G} = \sum_{\nu} \frac{1}{\sqrt{(e_{\nu} - \lambda)^2 + \Delta^2}}. \quad (4.2.2)$$

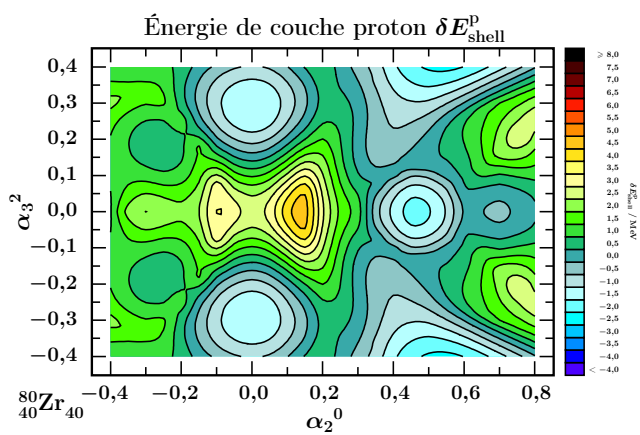
En présence d'un saut d'énergie, $e_{\nu} - \lambda$ augmente. Cette équation ne peut être satisfaite que si Δ diminue. Observons que les manifestations de la symétrie tétraédrique exprimées à l'aide de l'énergie de couche δE_{shell} sont très similaires pour $N = 40$, $N = 56$ et $N = 70$ bien qu'en passant de ^{80}Zr à ^{110}Zr , le nombre de neutrons a presque doublé. Nous concluons que la symétrie tétraédrique peut se manifester de manière intense dans plusieurs secteurs du tableau périodique (comme cela a été démontré aussi par plusieurs autres auteurs [32] et [33] bibliographie p. 175).



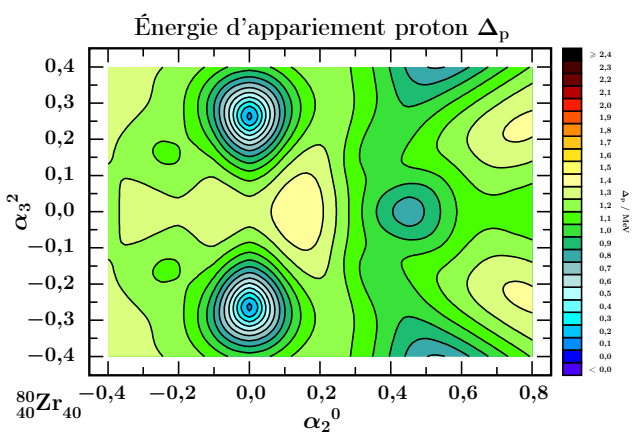
(a)



(b)

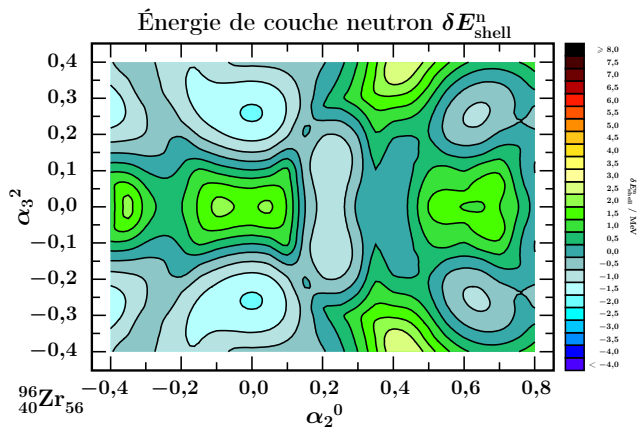


(c)

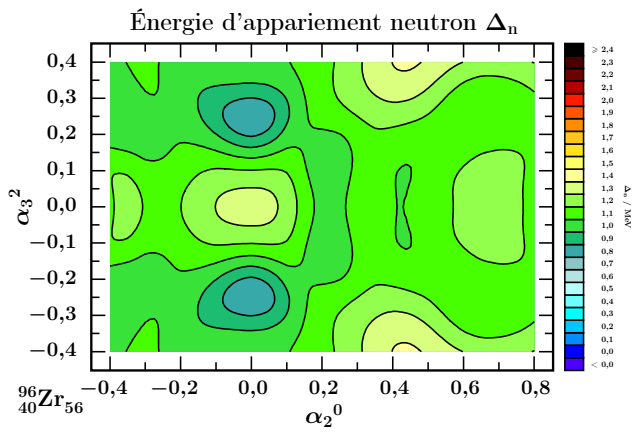


(d)

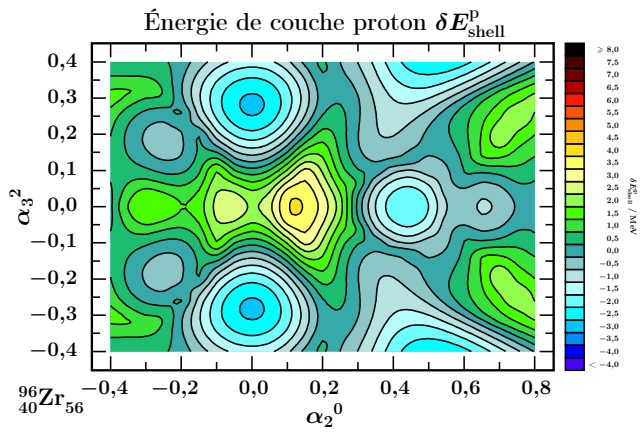
Figure 4.7 – Énergies de couche et d'appariement Δ de ^{80}Zr dans le plan (α_2^0, α_3^2)



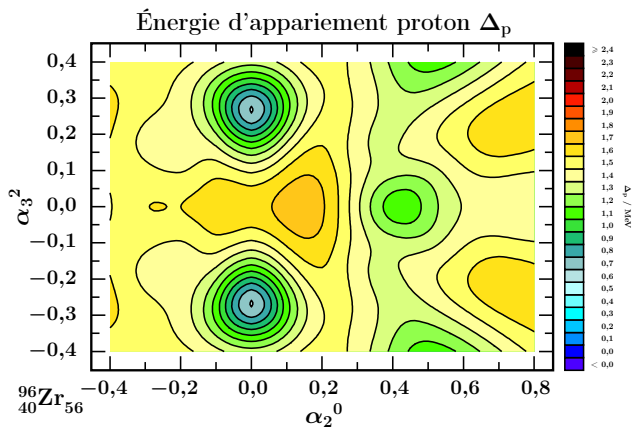
(a)



(b)

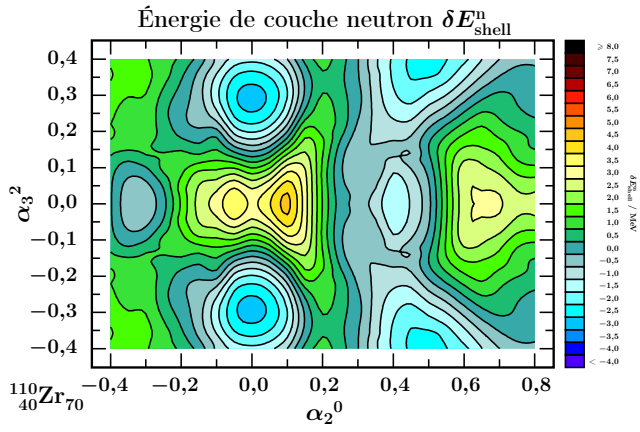


(c)

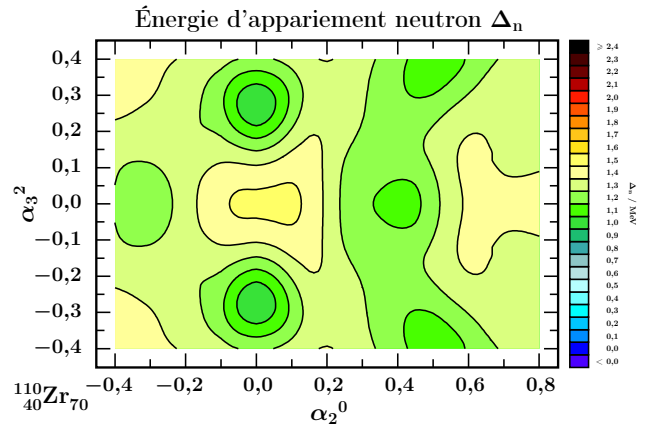


(d)

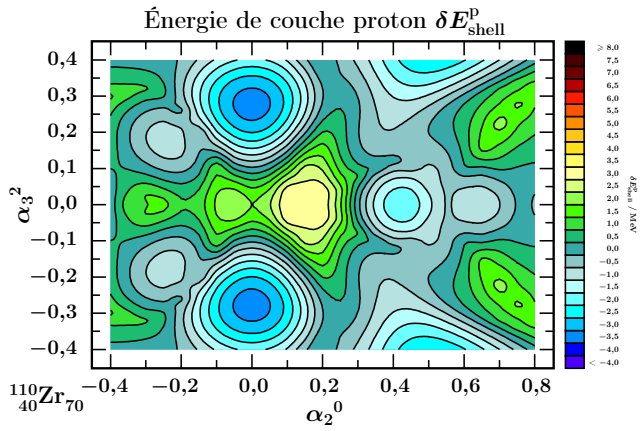
Figure 4.8 – Énergies de couche et d'appariement Δ de ^{96}Zr dans le plan (α_2^0, α_3^2)



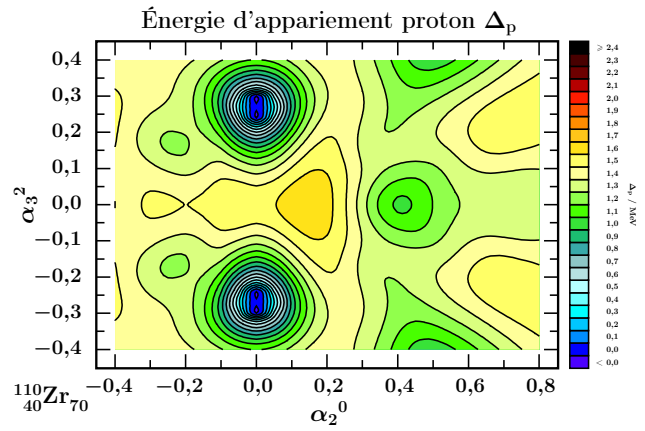
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure 4.9 – Énergies de couche et d'appariement Δ de ^{110}Zr dans le plan (α_2^0, α_3^2)

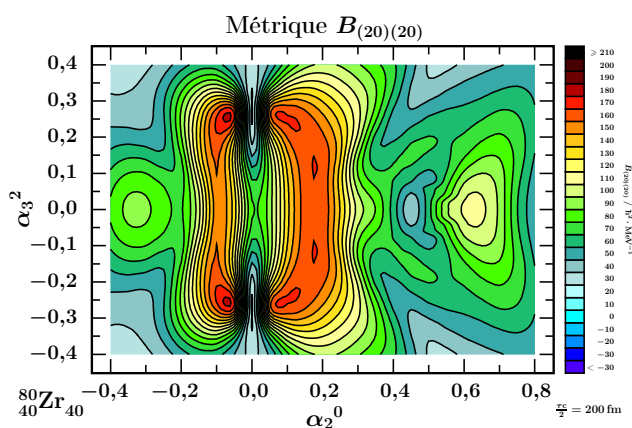
4.3 La part du champ moyen et celle de l'appariement dans le tenseur de masse

DANS LA section précédente, nous avons remarqué, dans les résultats de nos calculs, l'existence d'importants sauts d'énergie dans la structure en couche de niveau de particules individuelles. Ils se manifestent à travers des minima très prononcés des énergies dites de couches δE_{shell} et ils conduisent à la disparition de l'énergie Δ d'appariement BCS. Dans nos calculs, nous évitons les pathologies bien connues qui se produisent au sein de l'approximation BCS lorsque Δ disparaît. Plus précisément, nous utilisons l'argument suivant. Puisque la moyenne de l'espacement énergétique des niveaux des particules individuelles est de l'ordre de 300 keV à 500 keV, il apparaît que les coefficients d'occupation

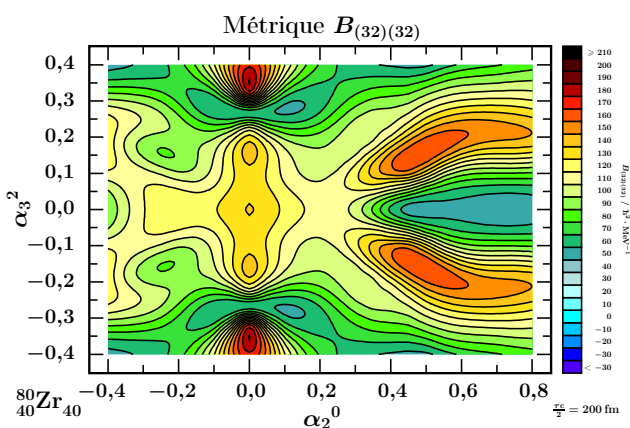
$$v_{\mu}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{e_{\mu} - \lambda}{\sqrt{(e_{\mu} - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right) \quad (4.3.1)$$

s'approchent de 0 ou 1 lorsque Δ approche la limite de 300 keV à 400 keV. Autrement dit, l'impact de $\Delta \approx 300$ keV ou $\Delta \approx 0$ keV sur les coefficients v_{μ}^2 est quasiment identique, alors que les valeurs des dérivées de l'énergie d'appariement Δ , comme $\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha}$, ont la possibilité de devenir très importantes. Cela conduit à un paradoxe connu : les conséquences de Δ qui tend vers zéro peuvent être grandes dans un domaine où l'approximation BCS est connue pour être défailante. Pour éviter de telles conséquences sur nos résultats du tenseur de masse, nous réglons arbitrairement Δ égal à la valeur limite de 400 keV chaque fois que la solution BCS est plus basse que cette valeur limite, en particulier si Δ devient nulle. Ayant ces ajustements à l'esprit, nous pouvons analyser les résultats de nos calculs dans les figures 4.10 p. 160 pour le ^{80}Zr , 4.11 p. 161 pour le ^{96}Zr et 4.12 p. 162 pour le ^{110}Zr . Nous y montrons les quantités $B_{ij} = M_{ij} + P_{ij}$, où M et P sont donnés par les équations (3.3.113) et (3.3.114) p. 123. Sans rappeler exhaustivement ces formules, nous devons signaler que P_{ij} contient des interventions des dérivées de l'énergie d'appariement par rapport aux déformations $\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha}$. Il est important de remarquer que P_{ij} est significativement plus petit que M_{ij} sauf aux endroits où l'appariement est faible. À ces endroits nous observons des pics du tenseur P_{ij} et nous pensons que ces pics ont une signification physique. La valeur de Δ est alors réglée à la valeur limite de 400 keV assurant donc des variations régulières des coefficients v_{μ}^2 . Cette discussion nous amène à une conjecture : chaque fois que des groupes de symétrie puissants sont en jeu, les sauts d'énergie des particules individuelles sont grands. Toutefois, cela implique que l'appariement BCS disparaisse et provoque un phénomène analogue à une transition de phase dans la physique de la matière condensée, mais dans un système avec un nombre fini de nucléons. Dans ce sens, nous parlons d'un lien entre l'apparition d'un groupe de symétries, les grands sauts d'énergie dans les couches et les transitions de phase de l'appariement nucléaire. De telles transitions semblent produire de forts pics dans toutes les composantes du tenseur de masse suivis des importantes conséquences physiques possibles mentionnées précédemment :

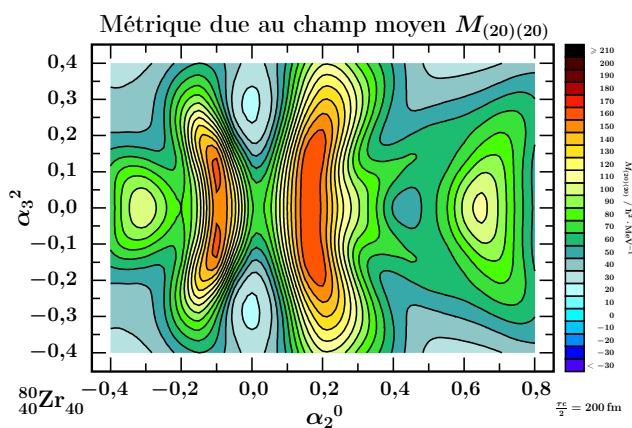
- l'abaissement des énergies collectives lors d'un accroissement des composantes du tenseur de masse ;
- l'augmentation des probabilités de trouver le noyau, système à A particules, dans des situations de transition de phase avec une augmentation importante possible du déterminant du tenseur de masse.



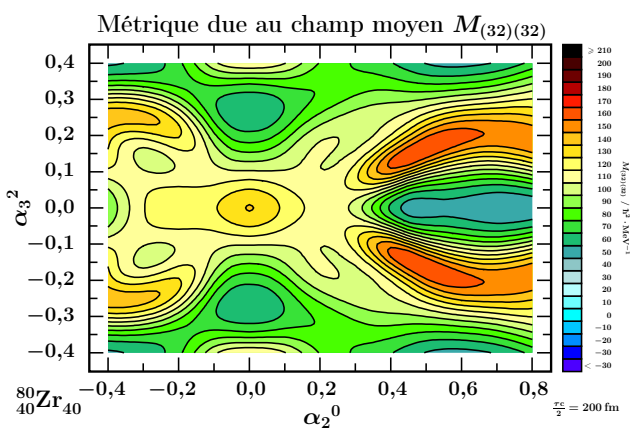
(a)



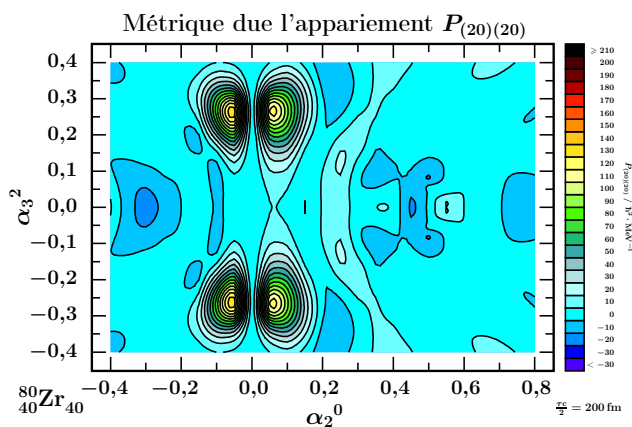
(b)



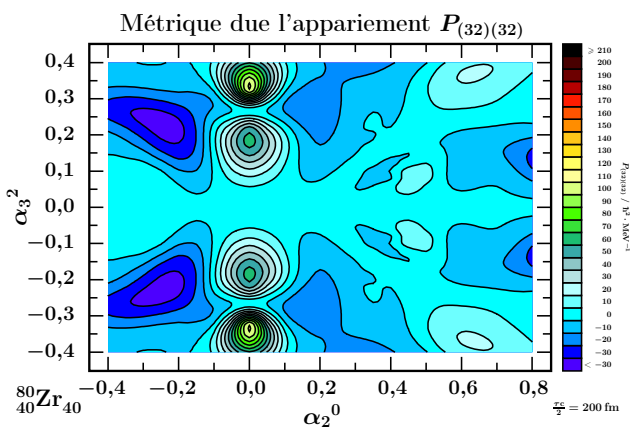
(c)



(d)

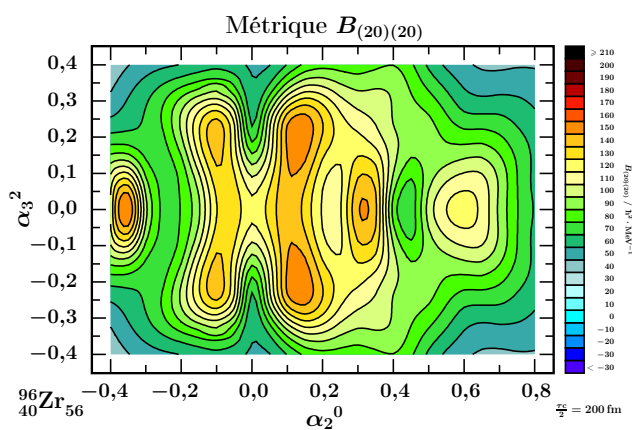


(e)

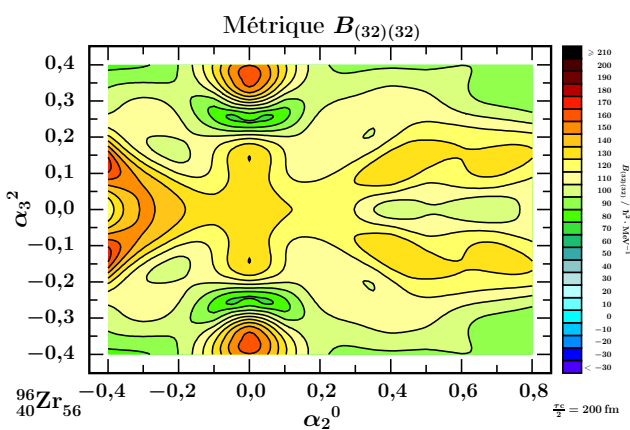


(f)

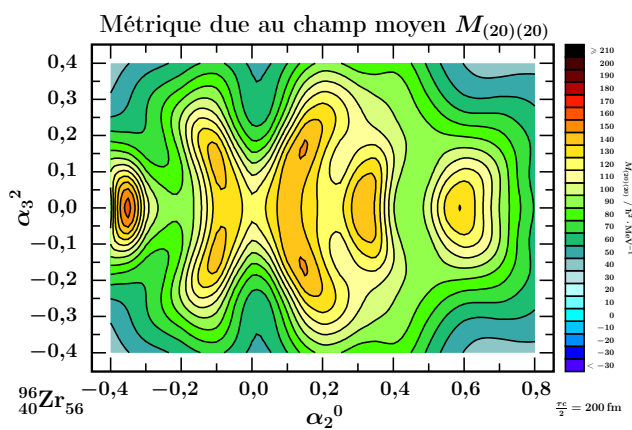
Figure 4.10 – Décomposition du tenseur de masse et transition de phase de l'appariement pour ^{80}Zr



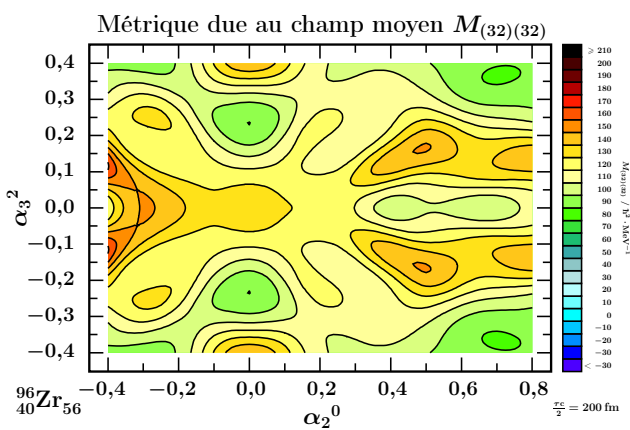
(a)



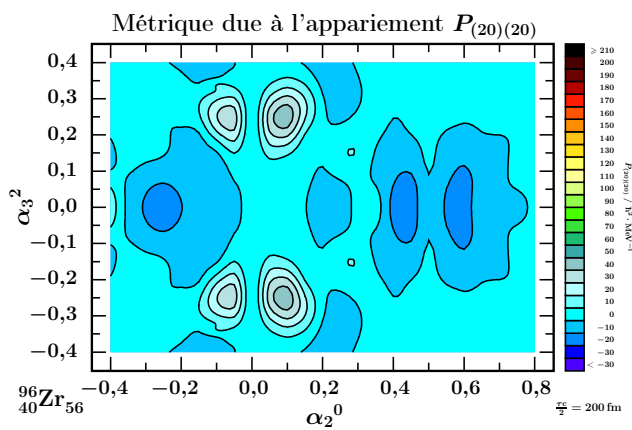
(b)



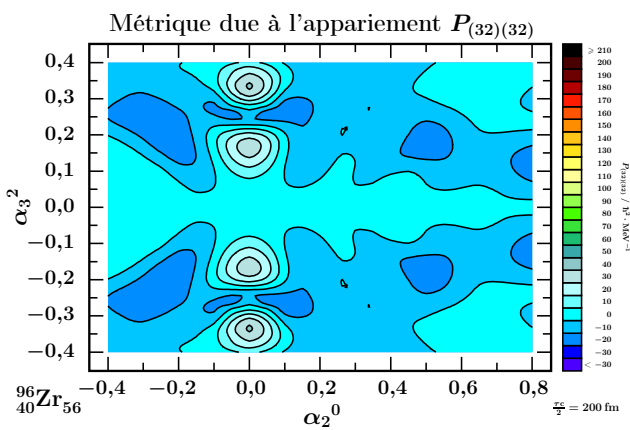
(c)



(d)

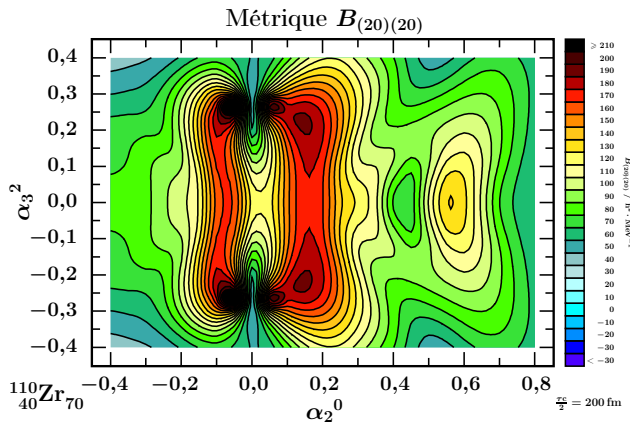


(e)

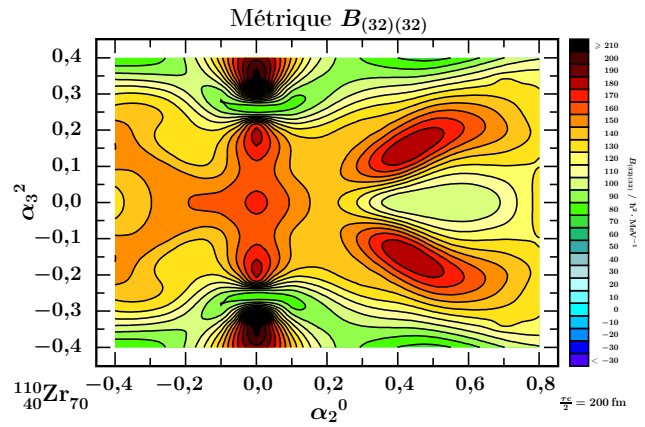


(f)

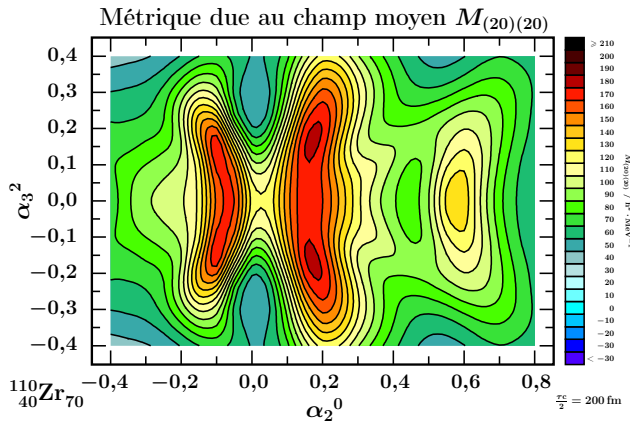
Figure 4.11 – Décomposition du tenseur de masse et transition de phase de l'appariement pour ^{96}Zr



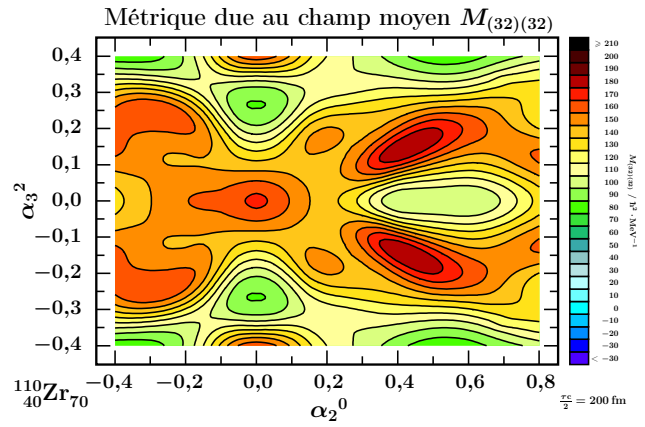
(a)



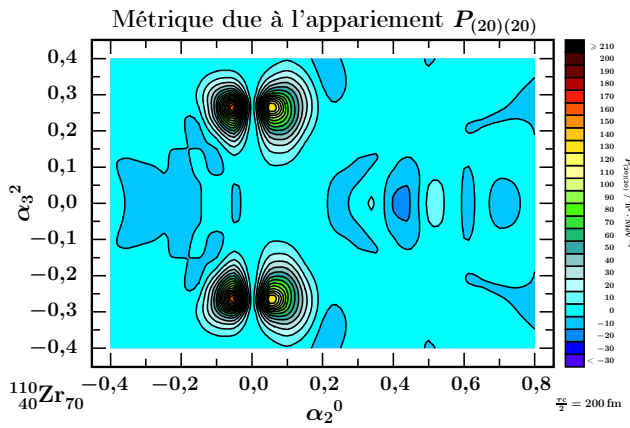
(b)



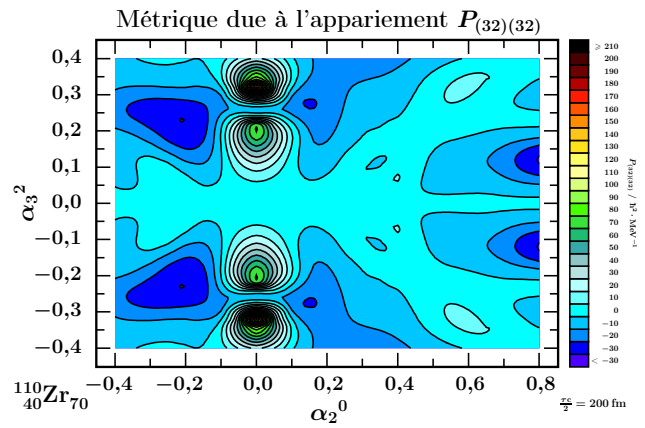
(c)



(d)



(e)



(f)

Figure 4.12 – Décomposition du tenseur de masse et transition de phase de l'appariement pour ^{110}Zr

4.4 Préparation à l'analyse des résultats sur le tenseur de masse

LE PROGRAMME WS_ODD calcule et résout l'équation de SCHRÖDINGER individuelle dans le cadre du champ moyen avec un appariement monopolaire. Il détermine l'énergie du noyau en utilisant la méthode de STRUTINSKY. Il calcule par la même occasion le tenseur de masse suivant le formalisme utilisé habituellement, ou bien avec le nouveau formalisme incorporant les facteurs \mathcal{D}_m^n et la temporisatrice \aleph .

Les facteurs \mathcal{D}_m^n interviennent plus spécifiquement pour les coordonnées de forme non axiales et dans le cas des symétries de haut rang. Ces situations vis-à-vis du tenseur de masse ont été assez peu étudiées.

La temporisatrice \aleph dont l'expression est donnée au théorème 3 p. 31 dans le chapitre 1

$$\aleph_{0j}(\alpha; \tau) = 2 - 2 \operatorname{sinc} \left(\frac{\mathcal{E}_j(\alpha) - \mathcal{E}_0(\alpha)}{2\hbar} \tau \right) = 2 - 2 \operatorname{sinc} \left(\frac{\mathcal{E}_j(\alpha) - \mathcal{E}_0(\alpha)}{\hbar c} \frac{\tau c}{2} \right) \quad (4.4.1)$$

est fondamentalement nouvelle. Elle donne une mesure de la présence de deux échelles de durée dans les mouvement nucléaires. En posant

$$x = \frac{\mathcal{E}_j(\alpha) - \mathcal{E}_0(\alpha)}{2\hbar} \tau, \quad (4.4.2)$$

nous obtenons l'allure donnée à la figure 4.13. Cependant elle intervient pour chaque niveau

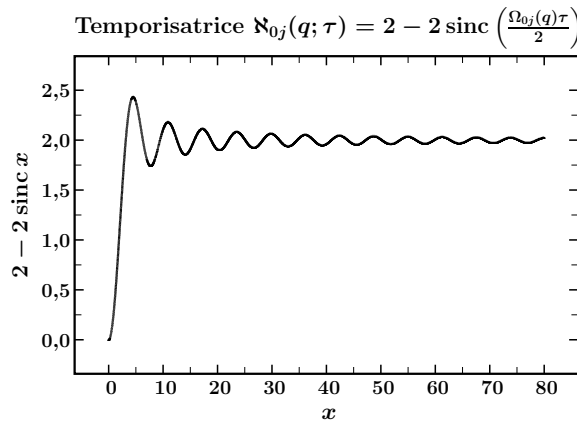


Figure 4.13 – Allure de la temporisatrice \aleph

excité avec une valeur différente et non pas de manière uniforme sur tout le tenseur de masse. En estimant que les états excités qui participent significativement correspondent à des excitations autour du niveau de FERMI, nous pouvons poser comme *ordre de grandeur*

$$\mathcal{E}_j(\alpha) - \mathcal{E}_0(\alpha) \approx 3 \text{ MeV}. \quad (4.4.3)$$

En effet, par exemple pour des noyaux d'actinides, $\Delta \approx 1 \text{ MeV}$ à 2 MeV et, à proximité du niveau de FERMI, les excitations sont majoritairement à deux quasiparticules. Ainsi :

$$\mathcal{E}_j(\alpha) - \mathcal{E}_0(\alpha) \approx E_1(\alpha) + E_2(\alpha) = \sqrt{(e_1 - \lambda)^2 + \Delta^2} + \sqrt{(e_2 - \lambda)^2 + \Delta^2} \approx 2\Delta. \quad (4.4.4)$$

Alors en prenant les valeurs extrêmes de τ de la proposition 3 p. 24 au chapitre 1

$$\tau = 5 \times 10^{-22} \text{ s} \quad \text{et} \quad \tau = 1 \times 10^{-21} \text{ s}, \quad (4.4.5)$$

nous avons

$$\frac{\tau c}{2} = 80 \text{ fm} \quad \text{et} \quad \frac{\tau c}{2} = 200 \text{ fm} \quad (4.4.6)$$

et

$$x = 1,2 \quad \text{et} \quad x = 3,1. \quad (4.4.7)$$

Dans ce cas, nous sommes dans la partie monotone croissante de la temporisatrice comprise

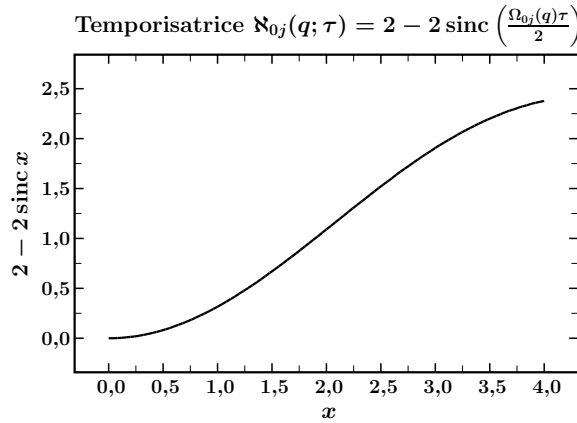


Figure 4.14 – Temporisatrice \aleph

entre

$$\aleph_{0j}(\alpha; \tau) \approx 0,5 \quad \text{et} \quad \aleph_{0j}(\alpha; \tau) \approx 2, \quad (4.4.8)$$

comme le montre la figure 4.13 p. 163 avec le détail de la temporisatrice de la figure 4.14 près de la limite $x = 0$. L'intervention de la temporisatrice \aleph n'est donc sans doute pas anodine et son influence doit être examinée soigneusement et systématiquement. Il faut remarquer que pour τ ou x croissant, la temporisatrice \aleph oscille avec une amplitude décroissante autour d'une asymptote constante et égale à 2. Dans ces conditions le tenseur de masse induit une contribution deux fois plus grande.

Néanmoins il y a encore d'autres points à examiner. Historiquement le calcul du tenseur de masse donna lieu à certaines approximations supplémentaires (en plus de l'approximation adiabatique, de l'approximation du champ moyen, de l'approximation BCS et de l'approximation sur la nature des états excités). Dans [23] bibliographie p. 145, on cite l'hypothèse que la contribution de l'énergie potentielle spin-orbite et l'énergie potentielle de COULOMB sont négligeables suivant les propositions de Daniel BÈS en 1961 (voir équation (IX.42)). Il y a également le fait

de négliger le terme P_{ij} dans B_{ij} lorsque $\Delta \gg G$ (voir équation (IX.48)). Le programme `WS_ODD` néglige aussi la part de l'énergie potentielle de COULOMB dans le tenseur de masse, mais incorpore toutes les autres contributions avec la possibilité de les supprimer sélectivement. Il est alors possible de vérifier la validité de chaque approximation antérieure.

Venons-en maintenant à la manière de se préparer à l'analyse des résultats numériques. Le programme `WS_ODD` calcule, entre autre, l'énergie totale du noyau ainsi que le tenseur de masse (ses composantes et son déterminant). Ces grandeurs sont essentielles pour l'équation de SCHRÖDINGER collective qui doit être résolue dans la foulée par le programme `SE_COL` développé durant cette thèse. Avant même cette résolution, l'analyse des grandeurs essentielles fournies par `WS_ODD` peut indiquer des tendances fortes qui doivent nous guider dans l'utilisation du programme `SE_COL`. En effet, ce dernier ne peut fonctionner que pour un espace collectif ayant au plus quatre dimensions. Cela signifie que nous devons utiliser préalablement notre intuition pour le choix des dimensions effectivement pertinentes.

Les résultats sont présentés sous forme de cartes géographiques de coupes bidimensionnelles dans l'espace des coordonnées de forme. Selon une analogie avec la physique classique, une carte de l'énergie totale du noyau nous indique la ou les formes d'équilibre du noyau aux positions des minima d'énergie. Ces positions sont considérées, dans la littérature souvent incorrectement, du point de vue de la physique quantique comme les positions de maximum de probabilité de présence du noyau.

Maintenant, en anticipant un peu sur les résultats du dernier chapitre, nous pouvons dire qu'une carte de la *densité de métrique* (la racine carrée du déterminant B du tenseur de masse) nous indique les zones où la densité de probabilité est renforcée puisque la densité de probabilité dépend de la densité de métrique \sqrt{B} comme affirmé dans l'équation (6.4.5) p. 235

$$\rho = \sqrt{B}|\Upsilon|^2, \quad (4.4.9)$$

où $|\Upsilon|$ est le module de la fonction d'onde collective. Il est donc très important de confronter une carte de l'énergie totale du noyau avec celle de la densité de métrique \sqrt{B} . En effet, dans un espace d'EUCLIDE où le tenseur de masse est uniforme, le maximum de densité de probabilité¹ est uniquement influencé par le minimum de l'énergie et c'est pourquoi la densité de probabilité est la plus forte au voisinage de ce minimum d'énergie. Mais maintenant, la non-uniformité de la densité de métrique \sqrt{B} change radicalement le panorama et conduit à une compétition entre les maxima de la densité de métrique et les minima de l'énergie totale du noyau.

Nous pouvons aussi disposer des cartes des composantes du tenseur de masse pour les neutrons et les protons ainsi que de leur énergie d'appariement. L'interprétation des composantes du tenseur de masse est moins simple que celle de son déterminant. Nous pouvons nous aider de la mécanique du solide, qui définit le tenseur d'inertie d'un solide. Lorsque les axes du repère sont choisis sans aucune précaution simplificatrice, le tenseur symétrique a six composantes indépendantes, *a priori* non nulles. Cependant, en changeant de repère et en prenant les axes

1. Une exception importante à cette règle est obtenue avec les solutions à un phonon qui engendrent les têtes de bandes octupolaires. Par la structure même de la fonction d'onde à un seul phonon, la probabilité d'être à la déformation d'équilibre est rigoureusement nulle. Ceci constitue un autre argument fort pour chercher systématiquement les solutions de l'équation de SCHRÖDINGER collective; les recherches à l'aide du programme `SE_COL` sont en cours.

propres en tant qu'axes du repère, le tenseur prend une forme diagonale, très simple. S'il n'est pas possible de changer les axes du repère, dans la mesure où ils correspondent à des contraintes mécaniques telles que l'axe de rotation d'une roue, alors c'est le solide lui-même qu'il faut modifier en changeant la répartition de la matière ; ce sont les équilibres statique et dynamique d'une roue ou d'un tambour de lave-linge. Lorsque le tenseur d'inertie a une forme diagonale, son interprétation physique devient simple en utilisant le fait qu'une composante diagonale mesure alors l'inertie à la rotation autour de l'axe associé à cette composante. Mais si les composantes mixtes, c'est-à-dire non diagonales, sont non nulles, cette interprétation cesse d'être pertinente.

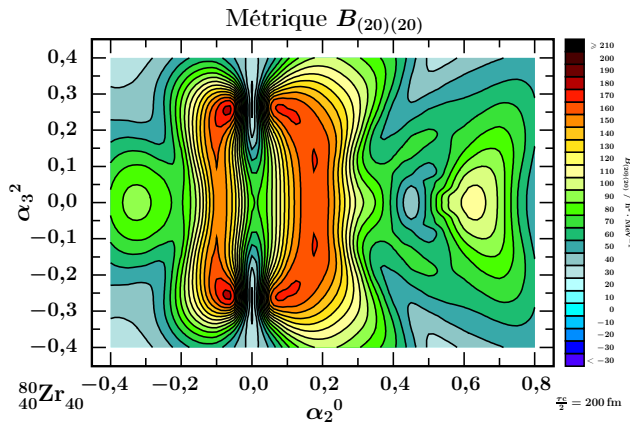
Quittons la mécanique du solide et revenons au modèle collectif du noyau. L'espace n'est plus un espace d'EUCLIDE et il n'existe plus d'axes propres identiques pour tous les points de l'espace. Autrement dit, si on trouve les axes propres en un point, ces axes ne sont plus axes propres en tout autre point voisin. Dans le cas où les composantes mixtes sont nulles, les composantes diagonales s'interprètent comme l'inertie du noyau à se déformer suivant la coordonnée de forme considérée. Cette interprétation est particulièrement mise en avant lorsqu'on écrit une équation collective harmonique à une dimension :

$$-\frac{\hbar^2}{2B_{(20)(20)}} \frac{d^2\Upsilon}{d(\alpha_2^0)^2} + \frac{1}{2}C (\alpha_2^0 - \alpha_{2\text{éq}}^0)^2 \Upsilon = \mathcal{E}\Upsilon. \quad (4.4.10)$$

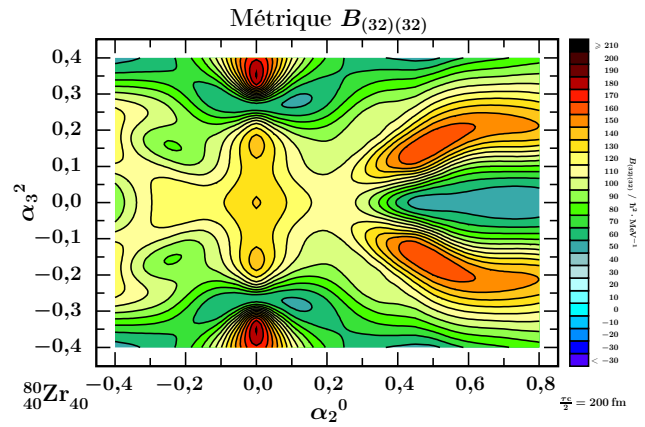
Alors plus B_{ii} est grand, plus le noyau en se dirigeant vers une telle déformation va avoir du mal à se déformer davantage (la vitesse classique diminue quand la masse augmente pour assurer une énergie cinétique constante). Les grandes valeurs de B_{ii} agissent donc comme des pièges, mais dans lesquels il est assez difficile d'entrer. En même temps, l'approximation harmonique de l'équation (4.4.10) implique que l'énergie d'oscillation collective est $\hbar\sqrt{\frac{C}{B_{ii}}}$. Ainsi une augmentation du tenseur de masse B_{ii} d'un facteur 2 venant de la temporisatrice implique une diminution de l'énergie collective $\hbar\sqrt{\frac{C}{B_{ii}}}$ par un facteur $\sqrt{2}$.

4.5 Les composantes du tenseur de masse

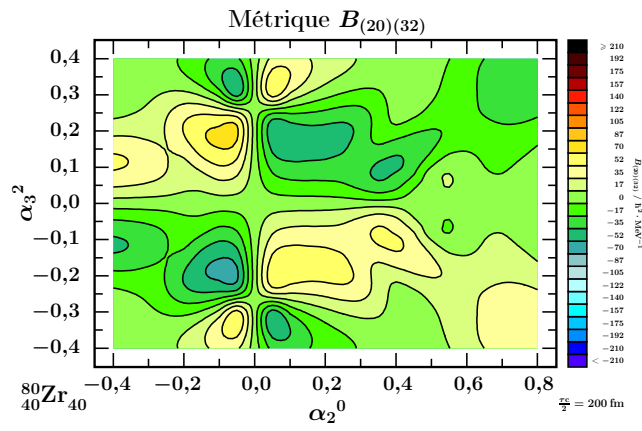
LES FIGURES 4.15 p. 167, 4.16 p. 168 et 4.17 p. 169 confrontent les composantes du tenseur de masse. Dans les composantes du tenseur de masse, nous pouvons remarquer que la composante mixte, c'est-à-dire non diagonale $B_{(20)(32)}$, est systématiquement bien plus faible que les deux autres. Nous pouvons donc considérer que, dans une bonne approximation, le tenseur de masse est diagonal, ce qui simplifie beaucoup l'interprétation. La carte de la composante $B_{(20)(20)}$ doit être lue pour des déplacements parallèles aux abscisses exclusivement, et la carte de la composante $B_{(32)(32)}$ doit être lue pour des déplacements parallèles aux ordonnées exclusivement. Sur la carte de la composante $B_{(20)(20)}$, nous voyons systématiquement une vallée encaissée pour $\alpha_2^0 = 0,0$ avec deux ouvertures de la vallée autour de $\alpha_3^2 = \pm 0,3$. Comme sur une telle carte, nous ne devons considérer que les déplacements selon les abscisses, un noyau pris dans la vallée ne peut que très difficilement en sortir puisque, dès qu'il essaie, son inertie augmente très rapidement. Sur la carte de la composante $B_{(32)(32)}$ nous observons des positions particulières pour $\alpha_2^0 = 0,0$ et $\alpha_3^2 = \pm 0,3$. Ces points ressemblent à un pincement dans le relief. Un noyau pris dans ce pincement ne peut que très difficilement en sortir.



(a)

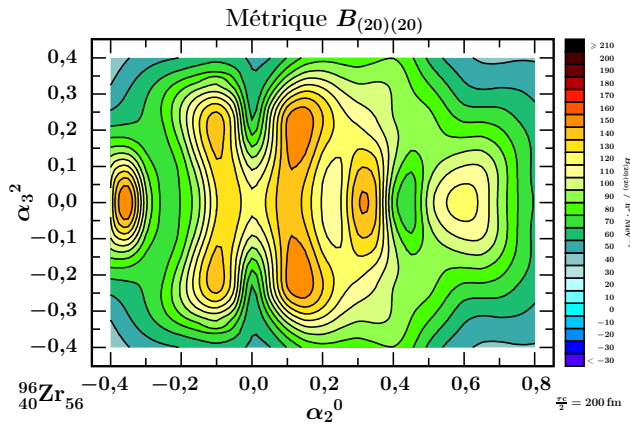


(b)

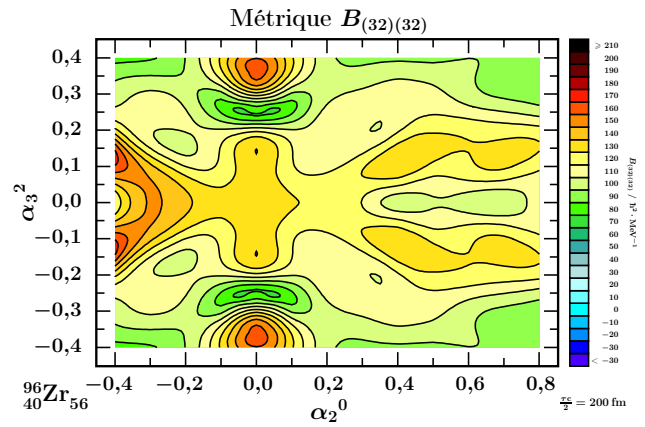


(c)

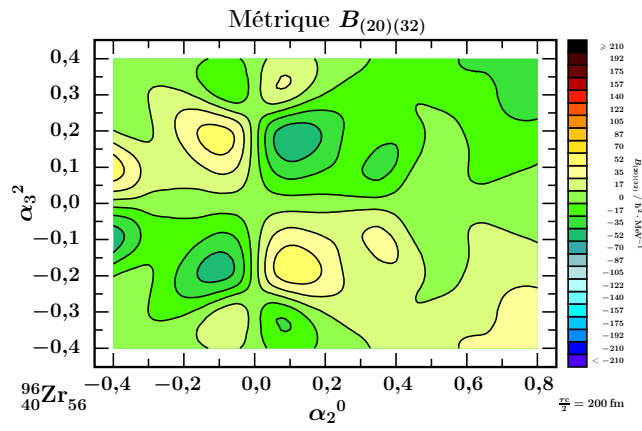
Figure 4.15 – Composantes du tenseur de masse $B_{(20)(20)}$, $B_{(32)(32)}$ et $B_{(20)(32)}$ de ${}^{80}\text{Zr}$ dans le plan (α_2^0, α_3^2)



(a)

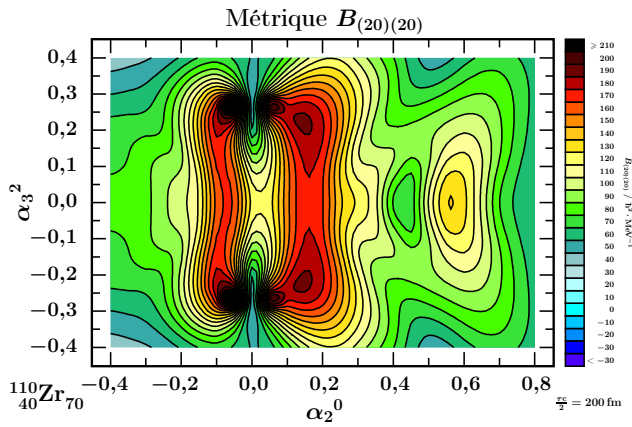


(b)

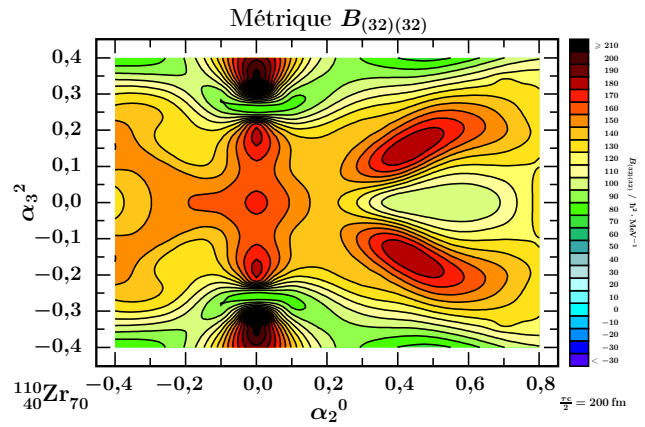


(c)

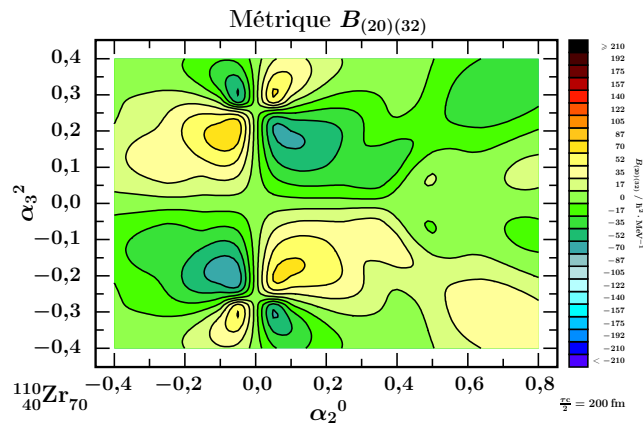
Figure 4.16 – Composantes du tenseur de masse $B_{(20)(20)}$, $B_{(32)(32)}$ et $B_{(20)(32)}$ de ${}^{96}\text{Zr}$ dans le plan (α_2^0, α_3^2)



(a)



(b)



(c)

Figure 4.17 – Composantes du tenseur de masse $B_{(20)(20)}$, $B_{(32)(32)}$ et $B_{(20)(32)}$ de ^{110}Zr dans le plan (α_2^0, α_3^2)

4.6 L'énergie potentielle collective et la densité de métrique : influence de la temporisatrice

NOUS AVONS fait le calcul, pour les trois noyaux de zirconium déjà envisagés précédemment, selon trois hypothèses sur la collectivité : un calcul sans la temporisatrice \aleph , un avec le paramètre de la temporisatrice $\frac{\tau c}{2} = 100$ fm et un avec $\frac{\tau c}{2} = 200$ fm. Les figures 4.18 p. 171, 4.19 p. 172 et 4.20 p. 173 résument brièvement ce que le code WS_ODD peut nous donner.

Avant de procéder à une description des résultats, nous devons préciser les unités utilisées. L'énergie collective est exprimée en MeV. Pour le tenseur de masse, nous nous référons à la formule de l'énergie cinétique collective classique

$$\bar{T} = \frac{1}{2} B_{(\lambda\mu)(\nu\rho)} \dot{\alpha}_{\lambda}^{\mu} \dot{\alpha}_{\nu}^{\rho}. \quad (4.6.1)$$

L'énergie étant toujours en MeV et les vitesses collectives étant en s^{-1} , nous trouvons que les composantes du tenseur de masse sont en $\text{MeV} \cdot s^2$. Or, dès l'expression primitive du tenseur de masse donnée dans l'équation (1.4.55) p. 31, nous remarquons que la constante \hbar^2 est toujours en facteur. C'est pourquoi, nous donnons systématiquement la valeur des composantes du tenseur de masse divisée par cette constante. Par conséquent les unités doivent corriger cette division. Et puisque $[\hbar] = \text{MeV} \cdot s$, nous en déduisons que les composantes du tenseur de masse seront exprimées en $\hbar^2 \cdot \text{MeV}^{-1}$. Quant à l'unité de la densité de métrique, elle n'est pas définissable de manière univoque. Elle dépend du choix de la taille du tenseur. Si nous travaillons avec deux dimensions, alors

$$\sqrt{B} = \sqrt{B_{11}B_{22} - B_{12}^2} \quad (4.6.2)$$

et il est clair que la densité de métrique dans un espace de dimension 2 s'exprime aussi en $\hbar^2 \cdot \text{MeV}^{-1}$. Dans tous les autres cas de dimensionnalité, il faudra être vigilant sur les unités.

Voici ce que nous pouvons comprendre de ces exemples. Tout d'abord, nous décrivons la carte de l'énergie potentielle collective. Dans le plan des coordonnées de forme prolata, tétraédrique, les noyaux de zirconium envisagés présentent trois minima d'énergie. Un minimum relatif prolata pour $\alpha_2^0 \approx 0,4$ et $\alpha_3^2 = 0,0$. Deux minima absolus (dans ce sous-espace), tétraédriques, avec $\alpha_2^0 = 0,0$ et $\alpha_3^2 \approx \pm 0,15$.

Ensuite passons à la densité de métrique. Nous trouvons deux maxima, non tétraédriques, pour $\alpha_2^0 \approx -0,1$ et $\alpha_3^2 = 0,0$, d'une part, et d'autre part, $\alpha_2^0 = 0,2$ et $\alpha_3^2 = 0,0$. Nous trouvons aussi trois minima, dont les positions sont très suggestives par rapport au minima de l'énergie totale. Nous avons un minimum relatif prolata, avec $\alpha_2^0 \approx 0,4$ et $\alpha_3^2 = 0,0$, et deux minima absolus et tétraédriques, avec $\alpha_2^0 = 0,0$ et $\alpha_3^2 = \pm 0,25$. En l'occurrence, nous ne trouvons pas une situation bien franche où un minimum absolu tétraédrique de l'énergie coïnciderait avec un maximum absolu tétraédrique du déterminant. En définitive, seule l'équation de SCHRÖDINGER collective et sa résolution sont susceptibles de livrer une réponse franche.

Le fait que la temporisatrice soit présente ou non influence beaucoup la valeur de la densité de métrique \sqrt{B} . Par ailleurs quand elle est présente, la valeur du paramètre $\frac{\tau c}{2}$ modifie grandement les valeurs de la densité de métrique. Pour $\frac{\tau c}{2} = 200$ fm, le relief est bien plus prononcé que

pour $\frac{\tau_c}{2} = 100$ fm. Une étude pour d'autres valeurs intermédiaires est nécessaire. Cependant si nous nous concentrons sur les positions des minima et des maxima, nous constatons que la temporisatrice ne les déplace pas.

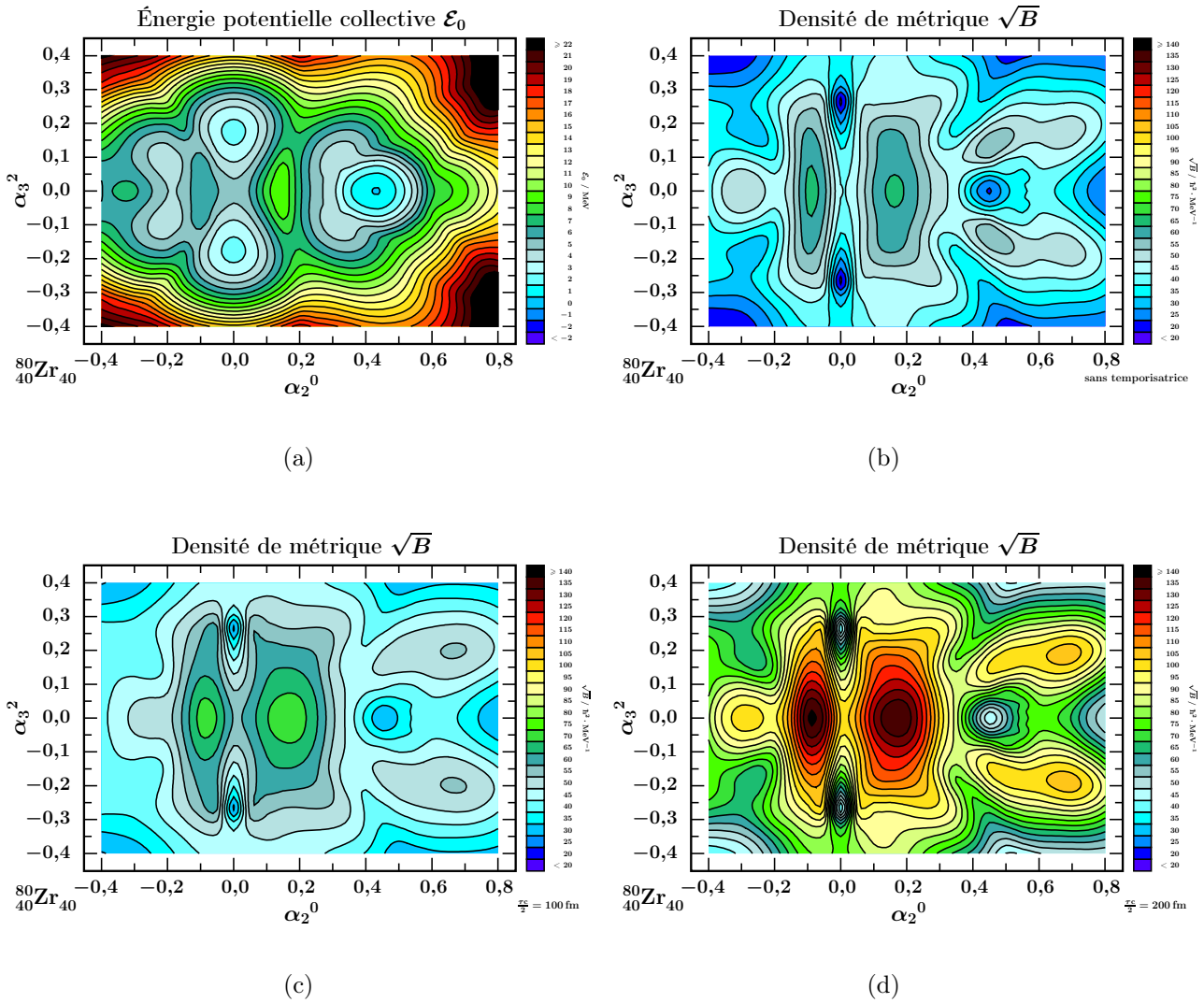
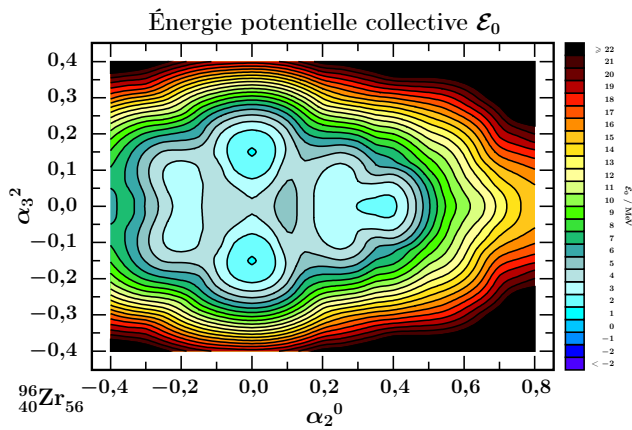
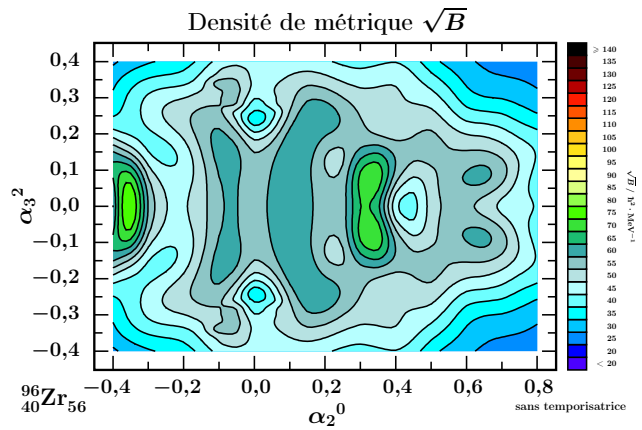


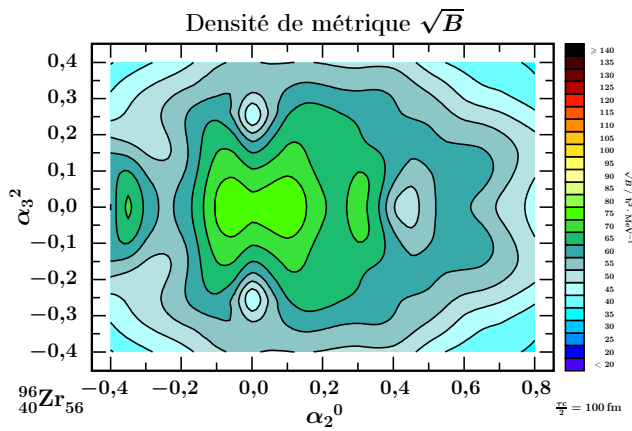
Figure 4.18 – Confrontation de l'énergie totale (a) du noyau de ${}^{80}\text{Zr}$ avec la densité de métrique dans l'espace (α_2^0, α_3^2) pour trois hypothèses sur la temporisatrice : sans temporisatrice (b), $\frac{\tau_c}{2} = 100$ fm (c) et $\frac{\tau_c}{2} = 200$ fm (d)



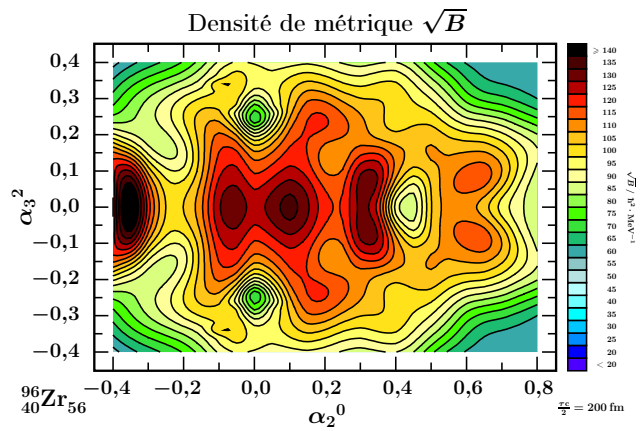
(a)



(b)

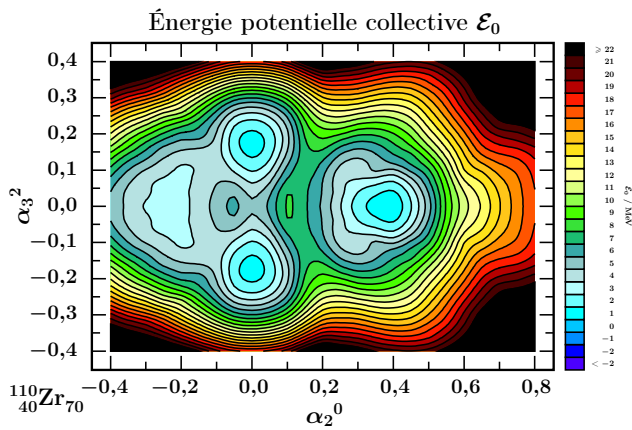


(c)

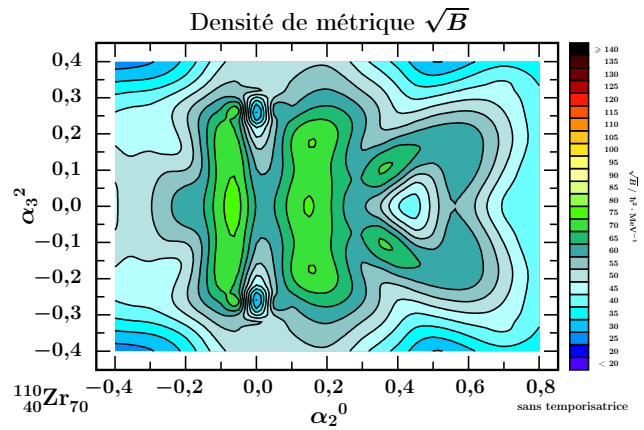


(d)

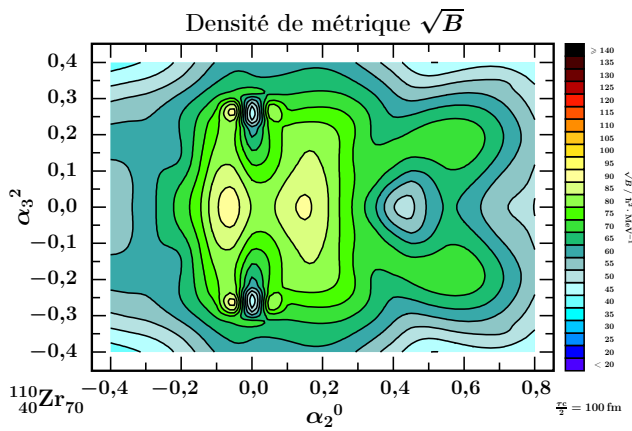
Figure 4.19 – Confrontation de l'énergie totale (a) du noyau de ^{96}Zr avec la densité de métrique dans l'espace (α_2^0, α_3^2) pour trois hypothèses sur la temporisatrice : sans temporisatrice (b), $\frac{\tau_c}{2} = 100$ fm (c) et $\frac{\tau_c}{2} = 200$ fm (d)



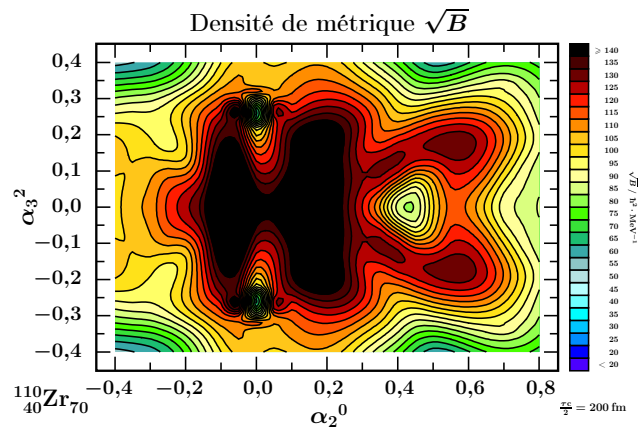
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure 4.20 – Confrontation de l'énergie totale (a) du noyau de ^{110}Zr avec la densité de métrique dans l'espace (α_2^0, α_3^2) pour trois hypothèses sur la temporisatrice : sans temporisatrice (b), $\frac{\tau_c}{2} = 100 \text{ fm}$ (c) et $\frac{\tau_c}{2} = 200 \text{ fm}$ (d)

En guise de conclusion à ce chapitre, nous rappelons que ce document présente le développement formel des idées sur un grand volume de pages. De ce fait, nous ne présentons que quelques exemples en tant qu'illustrations semi-quantitatives de prédictions sur le mouvement nucléaire collectif fondées sur les calculs du programme `WS_ODD`. L'étape suivante consiste en particulier à analyser la déformation la plus probable pour les solutions collectives à zéro et un phonon, obtenue avec le programme `SE_COL`. Avec cette déformation la plus probable, nous calculons les probabilités de transitions électromagnétiques réduites afin de pouvoir faire des comparaisons systématiques avec l'expérience. Cette part du projet est déjà commencée et peut être considérée comme une suite naturelle de cette thèse.

Nous devons désormais construire le cadre mathématique et physique pour obtenir l'équation de SCHRÖDINGER qui est associée à l'évolution collective.


Bibliographie du chapitre 4

- [28] P. T. GREENLEES, J. RUBERT, J. PIOT, B. GALL & ALL, « Shell-Structure and Pairing Interaction in SuperheavyNuclei : Rotational Properties of the $Z = 104$ Nucleus ^{256}Rf », Phys. Rev. Lett. 109, 012501, 2012.
- [29] J. RUBERT, B. GALL, O. DORVAUX, P. T. GREENLEES, Z. ASFARI, J. PIOT & ALL, « High-K isomeric states investigations in the ^{256}Rf superheavy element », to be submitted to Phys. Rev. C.
- [30] C. J. GALLAGHER, « Coupling of Angular Momenta in Two-Particle States in Deformed Even-Even Nuclei », Phys. Rev. 126, 4, 1962.
- [31] K. E. G. LÖBNER, « Systematics of Absolute Transition Probabilities of K -forbidden Gamma-ray Transitions », Phys. Lett. B26, 6, 1968.
- [32] J. DUDEK, A. GOŹDŹ, N. SCHUNCK & M. MIŚKIEWICZ, « Nuclear Tetrahedral Symmetry : Possibly Present throughout the Periodic Table », Phys. Rev. Lett. 88, 25, 2002.
- [33] J. DUDEK, D. CURIEN, N. DUBRAY, J. DOBACZEWSKI, V. PANGON, P. OLBRATOWSKI & N. SCHUNCK, « Island of Rare Earth Nuclei with Tetrahedral and Octahedral Symmetries : Possible Experimental Evidence », Phys. Rev. Lett. 97, 7, 2006.

« Eh bien ! Abuse. Va, dans ce monde, il faut être un peu trop bon pour l'être assez. »
Pierre de MARIVAUX

Chapitre 5

La mécanique analytique au service de la physique nucléaire

 LE NOYAU de l'atome est un système microscopique et il n'est donc compréhensible que dans le cadre formel de la mécanique quantique. Et pourtant nous avons besoin de repasser un instant par la mécanique analytique de William HAMILTON, et cela pour deux raisons. Premièrement et fondamentalement car la mécanique analytique est la racine de la mécanique quantique, tant historiquement que formellement. En effet, pour résoudre le mouvement d'un système microscopique, on détermine généralement son hamiltonien classique et on utilise ensuite des règles de quantification pour aboutir aux équations du mouvement de la mécanique quantique. Secondement et pragmatiquement, parce que le modèle nucléaire collectif dont nous allons traiter nécessite de travailler dans un espace différent de l'espace ordinaire en usage dans la mécanique quantique. Dans la première section, nous nous replaçons au niveau des principes de la mécanique, puis nous développons le cadre mathématique de la covariance dans la deuxième et dans la troisième section. La quatrième section nous permet de disposer la mécanique dans ce cadre mathématique sous certaines conditions physiques données à la cinquième section. Les deux dernières sections préparent le passage à la mécanique quantique dans les espaces métriques non euclidiens de Bernhard RIEMANN.

5.1 Du principe de moindre action

AU COMMENCEMENT de son étude, le physicien doit préciser ce qu'il étudie, c'est-à-dire décrire le système, qui est un ensemble d'objets concrets ou idéalisés qu'on isole par la pensée du reste de l'Univers, et dont on étudie le mouvement. On décrit le mouvement d'un tel système à partir d'un certain nombre de coordonnées q^i et de vitesses $\dot{q}^i = \frac{dq^i}{dt}$ actualisées au cours du temps. On se donne ainsi les premières grandeurs qui vont permettre d'utiliser le langage mathématique dans la physique. Les divers assemblages de ces grandeurs constituent les divers espaces mathématiques utilisés comme cadre.

DÉFINITION 7 :

L'espace sous-tendu par les coordonnées est l'extension en configuration et le nombre de coordonnées qui sous-tendent cet espace s'appelle la dimension d de l'extension en configuration. L'espace sous-tendu par les coordonnées et les vitesses est l'espace de phase. ~~~~~

D'autres grandeurs sont nécessaires afin de pouvoir construire une théorie. Comme elles sont moins intuitives, nous les introduisons à l'aide de l'axiomatique qui est choisie afin que ces grandeurs coïncident avec des grandeurs qui ont paru historiquement pertinentes, telle la force vive¹ que nous appelons aujourd'hui l'énergie cinétique.

PRINCIPE 2 : EXISTENCE DU LAGRANGIEN

Tout système mécanique est caractérisé par une grandeur L homogène à une énergie, appelée lagrangien, et qui dépend des coordonnées q , des vitesses \dot{q} du système et du temps t . On postule que le lagrangien d'un système qui n'est soumis à aucune interaction s'identifie à l'énergie cinétique T du système, énergie cinétique qui est proportionnelle au carré d'une vitesse². Si le système est soumis à des interactions, elles sont toutes décrites par des énergies potentielles dont la somme est l'énergie potentielle V , et le lagrangien est alors

$$L = T - V. \tag{5.1.1}$$

~~~~~

À ce principe d'existence du lagrangien nous ajoutons un principe d'évolution, le principe de moindre action. Celui-ci doit nous permettre, à l'aide des mathématiques de retrouver toutes les règles observées dans les diverses formes de comportement mécanique que la physique nous dévoile, telles que les mouvements d'un noyau d'atome.

### PRINCIPE 3 : PRINCIPE DE MOINDRE ACTION

Le système occupant aux dates  $t_0$  et  $t'$  des positions bien déterminées  $q_0 = q(t_0)$  et  $q' = q(t')$ , il se meut de sorte que son action

$$S = \int_{t_0}^{t'} dt L(q, \dot{q}, t) \tag{5.1.2}$$

---

1. Entre 1652 et 1656, Christiaan HUYGENS découvrit l'importance de la grandeur  $mv^2$  dans la théorie mécanique des chocs. Il l'introduisit explicitement dans son traité de 1656 à travers un théorème fondé sur le principe d'Evangelista TORRICELLI

« Deux corps qui se rencontrent le font de telle manière que la somme des produits de chaque [masse] par le carré de la vitesse soit égale avant et après le choc. » [34] (bibliographie p. 222).

À ce moment-là, Isaac NEWTON n'avait pas encore publié les « Principes mathématiques de la philosophie naturelle ». En 1691, Gottfried Wilhelm VON LEIBNIZ introduisit le concept de force vive à partir des travaux de HUYGENS et de ses propres découvertes sur le calcul différentiel. Il s'en suivit une controverse entre les tenants de la quantité de mouvement  $mv$  — les newtoniens — et les tenants de la force vive  $\frac{1}{2}mv^2$  — les leibniziens. En 1740, la marquise Émilie DU CHÂTELET traduisit et commenta l'œuvre de NEWTON. Suite à l'expérience de Willem GRAVESANDE de 1721, qui consista à vérifier que des billes en chute libre s'enfoncent dans l'argile de manière proportionnelle au carré de la vitesse d'impact, elle ajouta dans son commentaire l'apport de LEIBNIZ et de la force vive à la mécanique de NEWTON.

2. Nous ne disons pas la vitesse car il ne s'agit pas nécessairement de la vitesse au sens usuel  $\frac{dq^i}{dt}$  mais plus généralement d'un nouveau type de vitesse dans l'extension en configuration, dont le carré est une forme quadratique de la vitesse usuelle.

soit extrémale par rapport à tout autre mouvement virtuel reliant les deux positions fixées.

~~~~~

En écrivant les conséquences mathématiques de ce principe sur le lagrangien, nous aboutissons (voir par exemple [35] et [36] bibliographie p. 222) à un théorème : les équations de Joseph-Louis LAGRANGE. Nous envisageons une variation infime du mouvement par rapport au mouvement réel et correspondant à un mouvement virtuel proche du mouvement réel, et nous appliquons le principe de moindre action.

THÉORÈME 20 : ÉQUATIONS DE LAGRANGE

Le mouvement d'un système mécanique se déroule de sorte que

$$\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) = 0, \quad 1 \leq i \leq d, \quad (5.1.3)$$

et, écrit de manière plus compacte,

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = 0, \quad \text{ou encore} \quad \nabla L - \frac{d\dot{\nabla} L}{dt} = 0.$$

~~~~~

Le symbole  $\nabla$  recouvre ici symboliquement le  $d$ -uplet  $\frac{\partial}{\partial q} = \left\{ \frac{\partial}{\partial q^i} \right\}$  dans l'extension en configuration de dimension  $d$ . Ce recouvrement symbolique est exact, que l'espace soit euclidien<sup>3</sup> ou non, car  $\nabla$  représente par définition la dérivée covariante<sup>4</sup>, et cette dérivée covariante s'identifie à la dérivée partielle puisque le lagrangien est un scalaire. Nous avons introduit une nouvelle notation,  $\dot{\nabla}$ , pour recouvrir symboliquement le  $d$ -uplet  $\frac{\partial}{\partial \dot{q}} = \left\{ \frac{\partial}{\partial \dot{q}^i} \right\}$  qui correspond à la dérivée covariante dans l'espace des vitesses.

Les équations de LAGRANGE sont une réalisation concrète et puissante du principe de moindre action, puisqu'elles permettent d'étudier et de prévoir les divers mouvements existants dans la nature. Les équations de LAGRANGE nous amènent aussi à définir une nouvelle grandeur afin de pousser la réalisation de la théorie plus loin. À partir du principe d'existence du lagrangien, nous écrivons la différentielle du lagrangien :

$$dL = \sum_{i=1}^d \left( \frac{\partial L}{\partial q^i} dq^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} d\dot{q}^i \right) + \frac{\partial L}{\partial t} dt = \frac{\partial L}{\partial q^i} dq^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} d\dot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (5.1.4)$$

Par la suite, nous utilisons abondamment la convention d'EINSTEIN, qui consiste à omettre le signe de somme  $\sum$  et à le considérer comme implicite dès qu'un indice est présent deux fois,

---

3. L'espace usuel est un espace euclidien, ce qui signifie que la géométrie s'applique comme dans la vie de tous les jours : en particulier le théorème de PYTHAGORE.

4. Dans l'espace usuel, l'opérateur différentiel  $\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$  constitue l'opérateur de dérivation dans l'espace. Cependant dans des espaces plus généraux, et qu'on finit toujours par rencontrer dans la physique comme nous l'allons montrer plus loin, cette affirmation doit être modifiée. C'est la dérivée covariante qui prend le relais de la dérivée partielle, comme nous allons le voir succinctement dans la section 5.2 p. 183 et de manière plus développée dans les annexes B<sub>5</sub> p. 207 et C<sub>5</sub> p. 213.

une fois en position inférieure et la seconde fois en position supérieure. Avec les équations de LAGRANGE, équations (5.1.3) p. 179, nous substituons la dérivée partielle par rapport à la position dans la différentielle du lagrangien pour obtenir

$$dL = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) dq^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} d\dot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial t} dt, \quad (5.1.5)$$

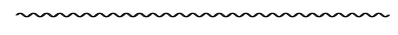
où la dérivée partielle du lagrangien par rapport à la vitesse joue un rôle central. C'est pourquoi nous introduisons la définition d'une nouvelle grandeur.

**DÉFINITION 8 :**

Nous nommons impulsion

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}, \quad (5.1.6)$$

et nous disons que l'impulsion est la grandeur conjuguée de la position.



Avec cette définition, la différentielle du lagrangien est réécrite

$$dL = \dot{p}_i dq^i + p_i d\dot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (5.1.7)$$

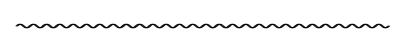
Nous avons désormais réintroduit le mobilier ontologique nécessaire à la mécanique, nous devons maintenant parler de l'espace dans lequel se déploie le mouvement. Pour cela nous allons d'abord rappeler le fondement mathématique des espaces qui nous sont nécessaires avant d'asseoir la physique dessus.

## 5.2 Des grandeurs intrinsèques dans l'espace

TOUTE THÉORIE ou expérience physique doit permettre de décrire ou prévoir la réalité et pour cela elle définit ou mesure des grandeurs. Cela se fait souvent dans le cadre de conventions. Nous trouvons parmi les plus communes le système international d'unités de mesure (le SI) ou bien le choix d'un repérage des positions sur la Terre. Les conventions adoptées sont des choix arbitraires nécessaires afin de traduire la réalité physique en une réalité numérique qui peut être travaillée mathématiquement. Le caractère arbitraire des conventions n'introduit cependant aucune subjectivité puisque les conventions sont toujours révocables et remplaçables tout en assurant la même description de la réalité physique. Par ailleurs la nature se déploie indépendamment de toutes ces conventions humaines. C'est pourquoi les résultats obtenus doivent être exprimables de manière invariante par tout changement de convention.

**DÉFINITION 9 :**

Une grandeur intrinsèque est une grandeur définie indépendamment de certaines conventions. Elle est intrinsèque uniquement vis-à-vis d'elles.



Dans ce sens, la théorie doit se munir de grandeurs intrinsèques qu'elle exprime ensuite dans le cadre de telle ou telle convention. Nous nous intéressons ici plus particulièrement à la convention

de repérage dans l'espace. Nous connaissons bien l'espace usuel avec ses trois dimensions dans lequel nous vivons. Mais la physique utilise bien d'autres espaces avec parfois plus de dimensions voire même une infinité de dimensions. Considérons un espace de dimension  $d$  dans lequel nous voulons repérer un point. Repérer un point revient à en donner les coordonnées vis-à-vis d'un repère formé de  $d$  axes de coordonnées. Le choix du repère est une convention. Dans l'espace usuel nous considérons souvent un repère cartésien avec trois axes orthogonaux. Mais ce n'est pas une obligation, les axes peuvent être non orthogonaux ou même non rectilignes.

La structure mathématique minimale qui permet de rendre compte de la nature intrinsèque d'une grandeur vis-à-vis du repère, est la structure d'espace vectoriel. Dans un espace vectoriel, il n'y a pas de points. Les grandeurs intrinsèques ne sont donc attachées à aucun point. Elles sont en quelque sorte définies exclusivement à l'origine. Le repérage ne sert donc pas à préciser une position dans l'espace, mais à indiquer les coordonnées des vecteurs et des tenseurs. Ainsi nous ne choisissons pas des axes, mais une base de vecteurs  $\{\vec{e}_i\}_{1 \leq i \leq d}$  et un vecteur  $\vec{v}$  s'écrit à partir de ses coordonnées  $v^i$  :

$$\vec{v} = v^i \vec{e}_i. \quad (5.2.1)$$

**PROPOSITION 12 :**

Les grandeurs intrinsèques par rapport à un changement de base sont les tenseurs, les vecteurs et les scalaires.



La base nous donne déjà une unité de mesure propre à chaque direction par le choix de la taille de chaque vecteur de base. Cependant les différents vecteurs d'une base sont *a priori* incommensurables dans la mesure où les unités dans chaque direction de la base peuvent n'avoir aucun rapport de signification entre elles. Cela fait que la notion de norme d'un vecteur n'a pas de sens et encore moins celle de distance<sup>5</sup>. Nous disons que dans un espace vectoriel, le mètre n'est pas orientable puisqu'il ne peut prendre que les directions de base. C'est la raison pour laquelle nous ne pouvons souvent pas nous contenter de cette structure mathématique, car elle n'offre pas un cadre suffisamment fort pour effectuer des mesures plus sophistiquées, telle la mesure de distance. Nous devons l'enrichir pour rendre compte de l'ensemble des observations. Dès que la structure de l'espace est plus riche (si le mètre est transportable ou orientable), les vecteurs de base engendrent les axes du repère et le système de coordonnées dont nous avons déjà parlé.

## Les variétés, lieux des tenseurs

Dans la suite, nous avons besoin de définir les grandeurs en différents lieux. C'est pourquoi nous sommes conduits à passer de la structure d'espace vectoriel à celle d'espace affine puis à celle de variété. Dans un espace vectoriel, les vecteurs et plus généralement les tenseurs ne sont attachés à aucun point de l'espace. Ils sont toujours pris à l'origine du repère. Mais nous avons besoin de considérer des vecteurs attachés en divers points. La structure mathématique d'espace affine inclut cette possibilité. Quant à la structure de variété, c'est une généralisation

---

5. Nous pouvons donner un exemple d'un espace où il n'existe pas de distance. Nous prenons cet exemple dans la thermodynamique où l'état d'un système est représenté entre autres sur un diagramme pression-volume. Ce diagramme est un espace où la mesure de la distance entre deux points n'a aucun sens.

de celle d'espace affine. Typiquement et pour fixer les idées, dans le cas de deux dimensions, un espace affine est un plan et une variété est une nappe de forme quelconque comme une sphère, ou la surface de la Terre avec son relief compliqué. Pour expliquer ce qu'est une variété Patrick POPESCU-PAMPU dit :

« Vous voyez ce qu'est une surface, par exemple une feuille de salade ? Eh bien, une variété c'est la même chose, mais en dimension quelconque. » [37] (bibliographie p. 222)

Et Élie CARTAN écrivit :

« La notion générale de variété est assez difficile à définir avec précision. Une surface donne l'idée d'une variété à deux dimensions. Si nous prenons par exemple une sphère ou un tore, nous pouvons décomposer cette surface en un nombre fini de parties telles qu'il existe une représentation biunivoque de chacune de ces parties sur une région simplement connexe du plan euclidien. [...] Dans les exemples précédents, chaque variété est définie par un ensemble de points situés dans un espace préexistant. Mais on peut aussi imaginer des variétés *in abstracto*. Dans le cas général, une variété à  $n$  dimensions est caractérisée par la possibilité de représenter le voisinage de chaque point  $P_0$  au moyen d'un système de  $n$  coordonnées susceptibles de prendre toutes les valeurs possibles au voisinage du système de valeurs qui représente  $P_0$ . » [38] (bibliographie p. 222).

Dans une variété, nous utilisons la notion d'espace affine tangent au point considéré pour nous ramener localement à un espace affine. Par conséquent la notion de base se prolonge des espaces vectoriels vers les espaces affines, puis vers les variétés à travers l'espace affine tangent. Désormais il existe une base en chaque point et il n'y a aucune raison de dire qu'elles sont identiques. C'est pourquoi si le mètre n'est pas orientable dans les espaces vectoriels, il ne l'est pas davantage dans les variétés, mais en outre il n'est pas non plus *a priori* transportable. Cependant c'est maintenant la donnée d'un système de coordonnées des points qui prend un sens à l'échelle de l'espace tout entier et qui supplante la base des espaces vectoriels. Le nombre  $d$  de coordonnées nécessaires au repérage d'un point dans la variété ne dépend pas du point considéré ; c'est la dimension de la variété. Si les coordonnées sont des nombres réels alors la variété est réelle et si les coordonnées sont des nombres complexes alors la variété est complexe.

Avant d'enrichir encore plus les propriétés de l'espace, nous donnons une définition pratique des tenseurs de rang et de variance quelconques. Ce n'est pas une définition qui semble convenable aux yeux d'un mathématicien. Une telle définition demanderait l'introduction des espaces tensoriels afin d'avoir un objet primitivement indépendant de toute base. Cependant, nous nous contentons de cette définition de physiciens (voir par exemple [39] et [40] bibliographie p. 222), qui découle de la définition des mathématiciens (voir par exemple [41] et [42] bibliographie p. 222). Cette définition contient aussi la définition des notions de covariance et de contravariance. Il n'est pas nécessaire de préciser plus leur origine et leur raison d'être, disons seulement que la covariance est désignée par un indice en position inférieure et la contravariance par un indice en position supérieure.

#### **DÉFINITION 10 : AU SUJET DES TENSEURS**

Soient deux systèmes de coordonnées  $q$  et  $\tilde{q}$  d'une variété. Un objet  $T$  comportant  $m \in \mathbb{N}$  indices contravariants et  $n \in \mathbb{N}$  indices covariants est un tenseur de rang  $r = \begin{bmatrix} m \\ n \end{bmatrix}$  si ses coordonnées

suivent la loi de transformation <sup>6</sup>

$$\tilde{T}_{\ell_1 \dots \ell_n}^{k_1 \dots k_m} = T_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_m} \prod_{\mu=1}^m \frac{\partial \tilde{q}^{k_\mu}}{\partial q^{i_\mu}} \prod_{\nu=1}^n \frac{\partial q^{j_\nu}}{\partial \tilde{q}^{\ell_\nu}}. \quad (5.2.2)$$

Nous devons aussi introduire de nouveaux objets dont le caractère intrinsèque est un peu plus faible que celui des tenseurs. Il est légitime de se demander ce que peut signifier un caractère intrinsèque affaibli. La définition de ces nouveaux objets, appelés *pseudotenseurs*, va éviter un long discours.

**DÉFINITION 11 : AU SUJET DES PSEUDOTENSEURS**

Soient deux systèmes de coordonnées  $q$  et  $\tilde{q}$  d'une variété. Un objet  $\mathcal{T}$  comportant  $m \in \mathbb{N}$  indices contravariants et  $n \in \mathbb{N}$  indices covariants est un pseudotenseur de rang  $r = \begin{bmatrix} m \\ n \end{bmatrix}$  et de poids  $w \in \mathbb{Z}^*$  si ses coordonnées suivent la loi de transformation

$$\tilde{\mathcal{T}}_{\ell_1 \dots \ell_n}^{k_1 \dots k_m} = \left( \frac{\partial q}{\partial \tilde{q}} \right)^w \mathcal{T}_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_m} \prod_{\mu=1}^m \frac{\partial \tilde{q}^{k_\mu}}{\partial q^{i_\mu}} \prod_{\nu=1}^n \frac{\partial q^{j_\nu}}{\partial \tilde{q}^{\ell_\nu}}, \quad (5.2.3)$$

où  $\frac{\partial q}{\partial \tilde{q}}$  est le jacobien du changement de coordonnées <sup>7</sup>.

Les tenseurs, dont les scalaires et les vecteurs, et les pseudotenseurs sont des fonctions des coordonnées, c'est pourquoi on parle de champs tensoriels. La nature réelle ou complexe d'un champ tensoriel est indépendante de la nature réelle ou complexe de la variété. Si la variété est réelle, les champs peuvent être réels ou complexes, mais ce sont obligatoirement des fonctions de variables réelles. L'étude et l'utilisation des champs nécessitent l'introduction d'une notion de dérivée, comme nous allons le voir maintenant.

## La connexion de l'espace

Dans l'état actuel, les propriétés de l'espace sont encore insatisfaisantes. La condition de transport du mètre est nécessaire afin de pouvoir comparer la valeur d'une grandeur entre différents points de l'espace. Pour cela il faut donner une connexion à l'espace et ainsi nous pouvons définir une dérivée des tenseurs, vecteurs et scalaires qui possède aussi la nature intrinsèque des tenseurs, vecteurs et scalaires. À partir de maintenant nous considérons que la variété est réelle

6. La loi de transformation donnée ici est l'unique loi de transformation dans le cas des variétés réelles. Mais dans le cas des variétés complexes, il existe d'autres lois de transformation qui utilisent la conjugaison complexe, voir l'annexe A<sub>5</sub> p. 205.

7. Le jacobien est le déterminant de la matrice jacobienne, la matrice des dérivées partielles de la fonction  $q(\tilde{q})$  et dont l'élément à la ligne  $i$  et à la colonne  $j$  est  $\frac{\partial q^i}{\partial \tilde{q}^j}$

$$\frac{\partial q}{\partial \tilde{q}} = \det \begin{bmatrix} \frac{\partial q^1}{\partial \tilde{q}^1} & \cdots & \frac{\partial q^1}{\partial \tilde{q}^d} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial q^d}{\partial \tilde{q}^1} & \cdots & \frac{\partial q^d}{\partial \tilde{q}^d} \end{bmatrix}. \quad (5.2.4)$$

et si ce n'est pas le cas, nous passons à la variété réellifiée<sup>8</sup> associée. La simple dérivée partielle ne convient pas car elle ne tient pas compte de la variation de la base dans l'espace. Mais en y ajoutant une correction liée à cette variation de la base, nous obtenons une dérivée des tenseurs qui est encore un tenseur. Il s'agit alors de la dérivée covariante désignée par définition par le symbole  $\nabla$  et dont l'expression utilise les symboles  $\Gamma_{ik}^j$  d'Elwin CHRISTOFFEL

$$\frac{\partial \vec{e}_i}{\partial q^k} = \Gamma_{ik}^j \vec{e}_j, \quad (5.2.5)$$

qu'il introduisit durant sa carrière universitaire à Strasbourg, et qui expriment les dérivées partielles des vecteurs de base par leur décomposition sur la base elle-même. Ce sont eux qui définissent la connexion des points entre eux assurant ainsi la transportabilité dans l'espace.

**THÉORÈME 21 : DÉRIVÉE COVARIANTE D'UN TENSEUR**<sup>9</sup>

La dérivée covariante d'un tenseur  $T$  de rang  $\begin{bmatrix} m \\ n \end{bmatrix}$  est le tenseur  $\nabla T$  de rang  $\begin{bmatrix} m \\ n+1 \end{bmatrix}$  et de coordonnées

$$\nabla_k T_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_m} = \frac{\partial T_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_m}}{\partial q^k} + \sum_{p=1}^m \Gamma_{\ell k}^{i_p} T_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_{p-1} \ell i_{p+1} \dots i_m} - \sum_{p=1}^n \Gamma_{j_p k}^{\ell} T_{j_1 \dots j_{p-1} \ell j_{p+1} \dots j_n}^{i_1 \dots i_m}. \quad (5.2.6)$$

Le symbole  $\nabla$  qui désigne la dérivée covariante retrouve sa signification usuelle dans le cas des opérateurs différentiels gradient, divergence et rotationnel dans l'espace euclidien à trois dimensions. Cependant nous ne pouvons pas donner d'expression formelle au symbole  $\nabla$  ou à ses coordonnées  $\nabla_k$  sans qu'il soit appliqué à un scalaire, vecteur ou tenseur. Il existe aussi une dérivée covariante pour les pseudotenseurs.

**THÉORÈME 22 : DÉRIVÉE COVARIANTE D'UN PSEUDOTENSEUR**

La dérivée covariante d'un pseudotenseur  $\mathcal{T}$  de rang  $\begin{bmatrix} m \\ n \end{bmatrix}$  et de poids  $w$  est

$$\nabla_k \mathcal{T}_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_m} = \frac{\partial \mathcal{T}_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_m}}{\partial q^k} + \sum_{p=1}^m \Gamma_{\ell k}^{i_p} \mathcal{T}_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_{p-1} \ell i_{p+1} \dots i_m} - \sum_{p=1}^n \Gamma_{j_p k}^{\ell} \mathcal{T}_{j_1 \dots j_{p-1} \ell j_{p+1} \dots j_n}^{i_1 \dots i_m} - w \Gamma_{\ell k}^{\ell} \mathcal{T}_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_m}. \quad (5.2.7)$$

Nous n'avons donné aucune expression de la connexion et en outre le mètre n'est toujours pas orientable. C'est pourquoi nous allons passer à la structure plus forte des espaces de RIEMANN, qui conduit automatiquement à la donnée d'une connexion à partir de celle d'une métrique.

### 5.3 Des espaces métriques

NOUS EN arrivons encore une fois à devoir enrichir la structure spatiale considérée afin de posséder une distance. Nous considérons donc un espace vectoriel ou une variété sur  $\mathbb{R}$  et nous dotons cet espace d'une métrique.

8. Nous discutons de la réellification d'une variété complexe à l'annexe A<sub>5</sub> p. 205.

9. Voir annexe B<sub>5</sub> p. 207.



**PROPOSITION 13 :**

Nous posons l'existence d'un tenseur ou d'un champ tensoriel, la métrique, de rang  $\begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix}$  symétrique dans le cas d'une métrique réelle ou bien hermitique dans le cas d'une métrique complexe

$$g_{ji} = g_{ij} \quad \text{ou bien} \quad g_{ji}^* = g_{ij}, \quad (5.3.1)$$

telle que la distance entre deux points infiniment voisins est par définition

$$(ds)^2 = g_{ij} dq^i dq^j \quad \text{ou bien} \quad (ds)^2 = g_{ij} (dq^i)^* dq^j. \quad (5.3.2)$$

L'espace est ainsi devenu un espace métrique ou espace de RIEMANN.

~~~~~

L'expression de la métrique en tant que fonction des coordonnées n'est pas donnée par l'algèbre linéaire, il nous faut une théorie externe. L'ajout de la métrique transforme l'espace vectoriel en espace vectoriel euclidien ¹⁰ (ou hermitien) ou la variété en variété euclidienne (ou hermitienne). Le qualificatif *euclidien* est utilisé dans la mesure où il existe maintenant une mesure de distance, mais ce qualificatif n'assure nullement que ce soit un espace d'EUCLIDE, défini un peu plus bas. Dans un espace euclidien ou hermitien, les vecteurs de base sont devenus commensurables et par conséquent le mètre est dès à présent orientable. Mais il n'est *a priori* pas transportable. Cependant la métrique impose automatiquement une connexion de l'espace, c'est-à-dire que les symboles de CHRISTOFFEL sont donnés par la métrique. Cela nous assure par la même occasion de pouvoir dériver les tenseurs de manière intrinsèque avec une dérivée covariante.

THÉORÈME 23 :

Dans un espace sans torsion ¹¹ et muni d'une métrique g_{ij} , les symboles de CHRISTOFFEL sont automatiquement ¹² définis à partir de la métrique ¹³

$$\Gamma_{kj}^i = \Gamma_{jk}^i = \frac{g^{i\ell}}{2} \left(\frac{\partial g_{j\ell}}{\partial q^k} + \frac{\partial g_{k\ell}}{\partial q^j} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial q^\ell} \right). \quad (5.3.3)$$

~~~~~

Dès lors, une variété munie d'une métrique est appelée *espace métrique* et nous supposons dans la suite être plongés dans un tel espace de sorte que le mètre est toujours orientable et transportable. Cela signifie que l'étalon de mesure peut être disposé dans n'importe quelle direction (alors que précédemment il ne pouvait être disposé que sur les axes) et qu'il est possible de le déplacer de point en point pour faire des comparaisons. L'espace métrique possède une courbure et parfois

---

10. Un espace euclidien ou hermitien est un espace vectoriel où on a défini un produit scalaire ou un produit hermitien. Le produit scalaire est défini par la donnée d'une forme bilinéaire réelle symétrique définie positive sur un espace vectoriel sur  $\mathbb{R}$ . Le produit hermitien est défini par la donnée d'une forme sesquilinéaire (une forme sesquilinéaire est une forme linéaire à droite et antilinéaire à gauche) complexe hermitique définie positive sur un espace vectoriel sur  $\mathbb{R}$  ou sur  $\mathbb{C}$  (voir par exemple [43] bibliographie p. 222).

11. En présence d'une torsion  $\Theta$ ,  $\Gamma_{kj}^i \neq \Gamma_{jk}^i$  et la torsion est définie par  $\Theta_{jk}^i = \Gamma_{jk}^i - \Gamma_{kj}^i$ .

12. Les symboles de CHRISTOFFEL n'ont pas besoin d'une métrique pour être définis mais l'existence d'une métrique implique la définition de ces symboles.

13. Voir annexe C<sub>5</sub> p. 213.

aussi une torsion<sup>14</sup>. Cependant il existe un cas particulier où l'espace est plat et sans torsion, l'espace d'EUCLIDE, pour lequel

$$\text{pour tout point } M \text{ de l'espace, } g_{ij}(M) = \delta_{ij}, \quad (5.3.4)$$

et qui caractérise notre espace usuel, celui dans lequel nous vivons.

Le tenseur métrique  $g_{ij}$  deux fois covariant est associé au tenseur deux fois contravariant  $g^{ij}$

$$g^{ij}g_{jk} = \delta_k^i = g_k^i. \quad (5.3.5)$$

Le tableau des  $g^{ij}$  est donc l'inverse au sens matriciel du tableau des  $g_{ij}$ . Avec ces deux tenseurs, nous pouvons définir le produit scalaire entre deux vecteurs.

**DÉFINITION 12 :**

Le produit scalaire entre deux vecteurs est

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = u^i v_i = g_{ij} u^i v^j = g^{ij} u_i v_j = u_i v^i, \quad (5.3.6)$$

ou bien

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = (u^i)^* v_i = g_{ij} (u^i)^* v^j = g^{ij} (u_i)^* v_j = (u_i)^* v^i. \quad (5.3.7)$$



Cette définition est une généralisation de la forme introductive de la métrique donnée dans la proposition 13 p. 185

$$(ds)^2 = g_{ij} dq^i dq^j = d\vec{q} \cdot d\vec{q} = d\vec{q}^2, \quad (5.3.8)$$

ou bien

$$(ds)^2 = g_{ij} (dq^i)^* dq^j = d\vec{q} \cdot d\vec{q} = d\vec{q}^2. \quad (5.3.9)$$

Nous sommes maintenant capables de définir la norme  $v$  d'un vecteur  $\vec{v}$

$$v = \sqrt{\vec{v}^2} = \sqrt{\vec{v} \cdot \vec{v}} = \sqrt{g_{ij} v^i v^j}, \quad (5.3.10)$$

ou bien

$$v = \sqrt{\vec{v}^2} = \sqrt{\vec{v} \cdot \vec{v}} = \sqrt{g_{ij} (v^i)^* v^j}. \quad (5.3.11)$$

Cette norme est clairement un scalaire réel. Nous ne garantissons pas encore le caractère réel positif de la norme, alors que c'est une exigence dans la définition mathématique du produit scalaire. Nous allons donner, dans la section 5.5 p. 195, la raison physique de la positivité. Cependant l'expression du produit scalaire n'est pas celle du produit scalaire usuel mais nous allons voir au scolie 7 p. 196 un moyen pour y revenir.

---

14. Voir annexe B<sub>5</sub> p. 207. Nous supposons dans la suite que la connexion est sans torsion. Tout comme la métrique, l'expression de la torsion doit être donnée par une théorie externe. L'hypothèse de l'absence de torsion pourrait s'avérer être à revoir.

## Le déterminant de la métrique, la densité de métrique

Voyons encore une propriété du déterminant de la métrique que nous venons juste d'introduire. Le déterminant de la métrique joue un rôle important, c'est pourquoi nous simplifions la notation

$$\det [g_{ij}] = g. \quad (5.3.12)$$

Considérons maintenant la loi de transformation de la métrique, celle d'un tenseur deux fois covariant qui se déduit de la définition 10 p. 182

$$\tilde{g}_{k\ell} = \frac{\partial q^i}{\partial \tilde{q}^k} \frac{\partial q^j}{\partial \tilde{q}^\ell} g_{ij}, \quad (5.3.13)$$

et prenons-en le déterminant. Alors, puisque le déterminant du produit est le produit des déterminants, nous arrivons à :

$$\tilde{g} = \left( \frac{\partial q}{\partial \tilde{q}} \right)^2 g, \quad (5.3.14)$$

ce qui prouve d'après la définition 11 p. 183 que le déterminant de la métrique est un pseudoscalaire de poids  $w = 2$ . Nous pouvons maintenant prendre la racine carrée du déterminant.

### THÉORÈME 24 :

La racine du déterminant de la métrique  $\sqrt{|g|}$  est un pseudoscalaire orienté<sup>15</sup> de poids  $w = 1$

$$\sqrt{|\tilde{g}|} = \left| \frac{\partial q}{\partial \tilde{q}} \right| \sqrt{|g|}. \quad (5.3.16)$$

Ce pseudoscalaire de poids  $w = 1$  est utilisé pour transformer  $dV = \prod_{i=1}^d dq^i$ , dont on peut montrer qu'il est un pseudoscalaire de poids  $w = -1$ , en un vrai scalaire orienté en posant

$$d\mathcal{V} = \sqrt{|g|} dV \quad (5.3.17)$$

afin de garantir le caractère intrinsèque du calcul intégral. Le volume élémentaire  $dV$  est une capacité accueillant le contenu volumétrique apporté par la racine carrée du déterminant de la métrique. Cette racine carrée du déterminant de la métrique a un statut similaire à celui d'une densité. Son usage étant important dans la suite, nous appelons la racine carrée du déterminant de la métrique,  $\sqrt{|g|}$ , *densité de métrique*. ~~~~~

Avant de nous pencher sur le calcul intégral dans un espace métrique, revenons au calcul différentiel. Nous avons dit plus haut que l'existence de la métrique donne immédiatement une connexion. Par conséquent la dérivation est bien autorisée et il est alors possible de définir tous les opérateurs différentiels usuels, et en particulier le laplacien, qui va nous être si utile par la suite.

---

15. L'orientation consiste dans le choix d'un signe devant la valeur absolue du jacobien car

$$\sqrt{|\tilde{g}|} = - \left| \frac{\partial q}{\partial \tilde{q}} \right| \sqrt{|g|} \quad (5.3.15)$$

conviendrait aussi.

## Le laplacien

La métrique et son déterminant possèdent une propriété<sup>16</sup> fort importante vis-à-vis de la dérivée covariante

### THÉORÈME 25 :

La dérivée covariante de la métrique est nulle :

$$\nabla_k g_{ij} = 0, \quad \nabla_k g^{ij} = 0, \quad \nabla_k g = 0. \quad (5.3.18)$$

L'existence de la métrique nous permet de passer de la covariance à la contravariance et donc de parler de dérivée contravariante en posant

$$\nabla^i = g^{ij} \nabla_j. \quad (5.3.19)$$

### DÉFINITION 13 : LE LAPLACIEN

Nous appelons laplacien, l'opérateur différentiel suivant

$$\Delta f = \nabla_i (\nabla^i f). \quad (5.3.20)$$

En utilisant la définition 12 du produit scalaire p. 186, le théorème 21 de la dérivée covariante d'un tenseur p. 184 et le théorème 25 sur la dérivée covariante de la métrique, nous aboutissons à des expressions explicites du laplacien avec le système de coordonnées  $q^i$ .

### THÉORÈME 26 :

Ces trois expressions explicites du laplacien sont équivalentes :<sup>17</sup>

$$\Delta f = \left( \frac{g^{ij} g^{kl}}{2} \frac{\partial g_{kl}}{\partial q^i} + \frac{\partial g^{ij}}{\partial q^i} \right) \frac{\partial f}{\partial q^j} + g^{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial q^i \partial q^j}, \quad (5.3.21)$$

$$\Delta f = \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left( \sqrt{|g|} g^{ij} \frac{\partial f}{\partial q^j} \right) \quad (5.3.22)$$

et

$$\Delta f = \frac{g^{ij} g^{kl} - 2g^{jl} g^{ik}}{2} \frac{\partial g_{kl}}{\partial q^i} \frac{\partial f}{\partial q^j} + g^{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial q^i \partial q^j}. \quad (5.3.23)$$

Nous sommes arrivés au terme de la préparation mathématique nécessaire pour supporter la physique. Il faut maintenant connecter les mathématiques à la réalité.

16. Voir l'annexe C<sub>5</sub> p. 216 et p. 217.

17. Voir l'annexe C<sub>5</sub> p. 219.

## 5.4 De la mécanique dans un espace de RIEMANN

NOUS AVONS appelé précédemment *extension en configuration* l'espace sous-tendu par l'ensemble des coordonnées nécessaires à la description du mouvement d'un système. Nous allons parler ici des propriétés de cet espace. Pour commencer, nous nous plaçons dans une situation classique, celle d'un système constitué de  $N$  points matériels en interaction entre eux et avec le reste de l'Univers, et liés par  $p$  liaisons. Le point matériel numéro  $i$  de masse  $m_i$  est repéré par ses trois coordonnées cartésiennes assemblées en un vecteur position  $\vec{r}_i$ . Le système mécanique qui se déplace est décrit, ou comme  $N$  mouvements juxtaposés dans l'espace usuel à trois dimensions, ou plus efficacement comme le mouvement d'un seul point dans l'extension en configuration à  $3N$  dimensions, que nous pouvons identifier à  $\mathbb{R}^{3N}$ . Nous étendons intuitivement la structure euclidienne de l'espace usuel à l'extension en configuration identifiée à  $\mathbb{R}^{3N}$ , la notion de distance y est donc définissable. Cependant la présence des  $p$  liaisons entre les points réduit les degrés de liberté du système de  $3N$  à  $n = 3N - p$ , le système ne peut effectivement pas atteindre tous les points de l'extension en configuration. C'est pourquoi nous allons considérer un sous-espace de dimension  $n = 3N - p$ , dans lequel tous les points sont accessibles, que nous appelons *extension en configuration réduite* (en anglais *configuration space*). Ce sous-espace n'a plus aucune raison d'être euclidien, comme nous allons le voir. En particulier la forme de ce sous-espace à l'intérieur de l'extension en configuration n'est pas nécessairement une forme simple telle que celle d'un plan ou d'une droite. C'est plus généralement une variété.

Dans l'extension en configuration le lagrangien a la forme habituelle, p. 178,

$$(5.1.1) \quad L = T - V,$$

où  $T$  est l'énergie cinétique et  $V$  l'énergie potentielle qui décrit les interactions. L'énergie cinétique de ce système classique est

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \left( \frac{d\vec{r}_i}{dt} \right)^2, \quad (5.4.1)$$

expression qui privilégie la conception des  $N$  mouvements juxtaposés dans l'espace usuel. Pour obtenir une expression qui privilégie la conception du mouvement d'un seul point dans l'extension en configuration, nous utilisons les coordonnées cartésiennes en posant

$$\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i) = (\tilde{q}^{3i-2}, \tilde{q}^{3i-1}, \tilde{q}^{3i}) \quad \text{avec} \quad 1 \leq i \leq N \quad (5.4.2)$$

et

$$\tilde{m}_{3i-2} = \tilde{m}_{3i-1} = \tilde{m}_{3i} = m_i \quad \text{avec} \quad 1 \leq i \leq N, \quad (5.4.3)$$

puis

$$\tilde{M}_{ij} = \tilde{m}_i \delta_{ij} \quad \text{avec} \quad 1 \leq i, j \leq 3N. \quad (5.4.4)$$

Ces définitions nous conduisent à une nouvelle expression de l'énergie cinétique

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3N} \tilde{M}_{ij} \dot{\tilde{q}}^i \dot{\tilde{q}}^j. \quad (5.4.5)$$

Nous introduisons alors de nouvelles coordonnées, les coordonnées généralisées  $q^i$ , afin de n'avoir que  $n = 3N - p$  coordonnées effectivement variables, les  $p$  autres demeurant arbitrairement et constamment nulles. Les liaisons sont supposées être des contraintes holonomes, qui s'écrivent mathématiquement par des relations qui verrouillent les  $p$  dernières coordonnées généralisées

$$\begin{aligned} F_1(\tilde{q}^1, \dots, \tilde{q}^{3N}, t) &= q^{n+1} = 0 \\ &\vdots \\ F_p(\tilde{q}^1, \dots, \tilde{q}^{3N}, t) &= q^{3N} = 0. \end{aligned} \quad (5.4.6)$$

Nous écrivons les relations entre les coordonnées cartésiennes  $\tilde{q}$  et les coordonnées généralisées  $q$

$$\tilde{q}^k = f^k(q^1, \dots, q^n, t), \quad 1 \leq k \leq 3N. \quad (5.4.7)$$

Ainsi nous nous déplaçons exclusivement et complètement dans l'extension en configuration réduite. La vitesse s'écrit

$$\dot{\tilde{q}}^k = \frac{d\tilde{q}^k}{dt} = \frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial q^i} \dot{q}^i, \quad 1 \leq k \leq 3N, \quad (5.4.8)$$

et en supposant en sus que les contraintes ne dépendent pas du temps, nous avons alors des contraintes scléronomes, et par conséquent

$$\dot{\tilde{q}}^k = \sum_{i=1}^n \frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial q^i} \dot{q}^i, \quad 1 \leq k \leq 3N, \quad (5.4.9)$$

qui s'étend évidemment aux dimensions éteintes puisque  $q^i = \dot{q}^i = 0$  pour  $n + 1 \leq i \leq 3N$

$$\dot{\tilde{q}}^k = \sum_{i=1}^{3N} \frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial q^i} \dot{q}^i, \quad 1 \leq k \leq 3N. \quad (5.4.10)$$

Nous voyons ainsi dans la transformation des coordonnées cartésiennes aux coordonnées généralisées, la transformation d'un vecteur contravariant, ce qui justifie *a posteriori* l'utilisation de l'exponentiation. Mais maintenant l'énergie cinétique peut être réécrite avec les coordonnées généralisées à partir de l'équation (5.4.5) p. 189

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^{3N} \tilde{M}_{k\ell} \dot{\tilde{q}}^k \dot{\tilde{q}}^\ell \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^{3N} \tilde{M}_{k\ell} \sum_{i=1}^{3N} \frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial q^i} \dot{q}^i \sum_{j=1}^{3N} \frac{\partial \tilde{q}^\ell}{\partial q^j} \dot{q}^j \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3N} M_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j \end{aligned} \quad (5.4.11)$$

après avoir posé

$$M_{ij} = \sum_{k,\ell=1}^{3N} \tilde{M}_{k\ell} \frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial q^i} \frac{\partial \tilde{q}^\ell}{\partial q^j}. \quad (5.4.12)$$

Nous reconnaissons dans cette loi de transformation, la loi de transformation des tenseurs deux fois covariants, ce qui justifie *a posteriori* l'utilisation de l'indexation en indice. Par ailleurs  $M_{ij}$  est un tenseur symétrique, indépendant du temps mais dépendant de la position du système dans l'extension en configuration réduite. L'expression de l'énergie cinétique peut être restreinte aux dimensions accessibles :

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n M_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j, \quad (5.4.13)$$

et en utilisant la convention d'EINSTEIN

$$T = \frac{1}{2} M_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j.$$

Que ce soit dans l'extension en configuration ou bien dans l'extension en configuration réduite, nous constatons que l'énergie cinétique est un scalaire, et qu'elle est issue d'une contraction entre le tenseur de masse et la vitesse. Nous sommes passés d'un ensemble de  $N$  espaces à trois dimensions à un espace à  $3N$  dimensions puis à un espace à  $n$  dimensions. Le mouvement du système est maintenant le mouvement d'un point dans ce dernier espace. Il est même possible de revenir à une forme originelle de l'énergie cinétique en définissant une distance  $s$  dans l'extension en configuration réduite telle que

$$T = \frac{1}{2} \left( \frac{ds}{dt} \right)^2.$$

L'énergie cinétique est une grandeur liée par essence au carré de la vitesse du point dans l'extension en configuration réduite, à condition d'incorporer la masse dans la distance  $s$  et de décider que la métrique est donnée par le tenseur de masse. La distance infinitésimale dans l'extension en configuration réduite est donnée par

$$(ds)^2 = M_{ij} dq^i dq^j.$$

Conformément à la proposition 13 p. 185, nous avons doté l'extension en configuration réduite d'une structure d'espace métrique de RIEMANN. Au début de cette section, nous avons supposé une structure euclidienne avec l'expression (5.4.1) p. 189. Mais une telle hypothèse n'est pas nécessaire. À partir de maintenant nous ne supposons même plus que l'extension en configuration ait d'emblée une structure euclidienne.

#### PRINCIPE 4 : ÉNERGIE ET STRUCTURE DE L'ESPACE

Nous postulons que l'énergie cinétique du système dans l'extension en configuration est

$$T = \frac{1}{2} M_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j, \quad (5.4.14)$$

où le tenseur de masse  $M_{ij}$  est symétrique. Nous décrétons aussi que l'expression de cette énergie confère à l'extension en configuration une structure d'espace métrique dont la métrique est le tenseur de masse. Cela définit la distance infinitésimale entre deux points infiniment proches dans l'espace

$$(ds)^2 = M_{ij} dq^i dq^j. \quad (5.4.15)$$

Avec cette définition l'énergie cinétique se ramène à la forme simple

$$T = \frac{1}{2} \left( \frac{ds}{dt} \right)^2. \quad (5.4.16)$$



Le symbole  $g_{ij}$  de la métrique est donc remplacé par  $M_{ij}$ .

**SCOLIE 6 : LA MASSE SUBORDONNÉE À L'ESPACE**

Le principe que nous venons d'écrire nous montre une conception de la masse différente de celle d'une simple propriété d'une particule ou d'un système. La masse, ou plus exactement le tenseur de masse, joue le rôle de la métrique de l'espace. La masse est donc subordonnée à l'espace et traduit finalement la relation des corps avec l'espace. La métrique décrit des propriétés fondamentales de l'espace indépendamment des mouvements qui s'y déroulent. C'est pourquoi elle peut dépendre de la position du point dans l'espace et du temps, mais toute dépendance vis-à-vis de la vitesse est exclue.

**Énergie cinétique effective**

Nous savons que la donnée d'une métrique permet de connecter les vecteurs covariants et les vecteurs contravariants. Or, nous avons défini antérieurement l'impulsion comme un vecteur covariant, p. 180 :

$$(5.1.6) \quad p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^k} = \dot{\nabla}_k L,$$

conjugué du vecteur position qui est lui contravariant. Nous pouvons donc écrire la jonction que la métrique réalise entre ces grandeurs. Avec l'expression du lagrangien, nous avons

$$p_k = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}^k} - \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^k} = \dot{\nabla}_k T - \dot{\nabla}_k V. \tag{5.4.17}$$

Or, nous sommes capables de calculer les dérivées de l'énergie cinétique

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}^k} &= \dot{\nabla}_k T = \frac{1}{2} M_{ij} \left( \dot{\nabla}_k \dot{q}^i \right) \dot{q}^j + \frac{1}{2} M_{ij} \left( \dot{\nabla}_k \dot{q}^j \right) \dot{q}^i \\ &= \frac{1}{2} M_{ij} \delta_k^i \dot{q}^j + \frac{1}{2} M_{ij} \delta_k^j \dot{q}^i \\ &= \frac{1}{2} M_{kj} \dot{q}^j + \frac{1}{2} M_{ik} \dot{q}^i, \end{aligned} \tag{5.4.18}$$

donc avec la symétrie de la métrique et le jeu sur les indices muets

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{q}^k} = \dot{\nabla}_k T = M_{ki} \dot{q}^i. \tag{5.4.19}$$

**DÉFINITION 14 :**

Nous nommons quantité de mouvement

$$P_k = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}^k} = \dot{\nabla}_k T = M_{ki} \dot{q}^i. \tag{5.4.20}$$



Cette relation peut être inversée

$$\dot{q}^j = M^{jk} P_k \quad (5.4.21)$$

en utilisant l'inversion du tenseur  $M_{ki}$  en  $M^{jk}$  avec

$$M_{ki} M^{jk} = \delta_i^j. \quad (5.4.22)$$

En général, la quantité de mouvement  $P_k$  ne s'identifie pas à l'impulsion  $p_k$

$$p_k = P_k - \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^k} = M_{ki} \dot{q}^i - \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^k} \quad (5.4.23)$$

à moins que l'énergie potentielle ne dépende pas de la vitesse (interaction locale<sup>18</sup>) puisqu'alors

$$\frac{\partial V}{\partial \dot{q}^k} = 0. \quad (5.4.26)$$

Nous sommes en mesure de donner plusieurs expressions de l'énergie cinétique en fonction de la vitesse  $\dot{q}$  ou de la quantité de mouvement  $P$  :

$$T = \frac{1}{2} M_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j = \frac{1}{2} P_i \dot{q}^i = \frac{1}{2} M^{ij} P_i P_j. \quad (5.4.27)$$

Nous aboutissons finalement à une expression de l'énergie cinétique en fonction de la position  $q$  et de l'impulsion  $p$  :

$$T = \frac{1}{2} M^{ij} p_i p_j + M^{ij} p_i \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^j} + \frac{1}{2} M^{ij} \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i} \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^j}. \quad (5.4.28)$$

Cette dernière expression suggère de définir de nouvelles grandeurs.

**DÉFINITION 15 :**

Nous appelons énergie cinétique effective

$$T_{\text{eff}} = \frac{1}{2} M^{ij} p_i p_j. \quad (5.4.29)$$

**DÉFINITION 16 :**

Nous appelons énergie potentielle vecteur

$$V_{\text{vec}} = -M^{ij} p_i \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^j} = -M^{ij} p_i \dot{\nabla}_j V. \quad (5.4.30)$$

---

18. Les interactions non locales sont assez répandues puisque la partie magnétique de l'interaction électromagnétique est non locale avec une énergie potentielle

$$V(\vec{r}, \vec{v}, t) = -q \vec{v} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t), \quad (5.4.24)$$

où la charge  $q$  située en  $\vec{r}$  se déplace à la vitesse  $\vec{v}$  dans le potentiel magnétique  $\vec{A}$ . L'impulsion de la particule ne coïncide pas avec la quantité de mouvement puisque

$$\vec{p} = m \vec{v} + q \vec{A}. \quad (5.4.25)$$

Nous retrouvons une telle situation en physique nucléaire avec l'interaction spin-orbite.

**DÉFINITION 17 :**

Nous appelons énergie potentielle tenseur

$$V_{\text{ten}} = -\frac{1}{2}M^{ij}\frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i}\frac{\partial V}{\partial \dot{q}^j} = -\frac{1}{2}M^{ij}\dot{\nabla}_i V \dot{\nabla}_j V. \quad (5.4.31)$$

Ces définitions nous permettent d'écrire une nouvelle forme de l'énergie cinétique

$$T = T_{\text{eff}} - V_{\text{vec}} - V_{\text{ten}}. \quad (5.4.32)$$

À ce stade nous avons donc redonné les lois de la mécanique et établi le cadre spatial de ces lois<sup>19</sup>. Nous sommes maintenant en mesure de rappeler très succinctement la formulation hamiltonienne de la mécanique avant de montrer comment elle conduit au passage à la mécanique quantique dans le cadre des espaces non euclidiens.

---

19. Nous pouvons vérifier que les équations de LAGRANGE prises dans le cadre des espaces métriques redonnent les équations de la dynamique de NEWTON-VARIGNON. Pierre VARIGNON réalisa une synthèse des travaux de NEWTON en mécanique et de LEIBNIZ sur le calcul différentiel. On connaît la controverse terrible entre NEWTON et LEIBNIZ à propos de la découverte du calcul infinitésimal. L'histoire des sciences a tranché en faveur de LEIBNIZ laissant à NEWTON le développement du calcul des fluxions qui est l'équivalent géométrique du calcul infinitésimal. Un physicien normalement constitué du 21<sup>e</sup> siècle qui lirait le texte de NEWTON, paru en 1687, n'y retrouverait pas ses petits : point de vitesse, point d'accélération, point de force au sens d'aujourd'hui et un calcul des fluxions difficilement abordable. Mais treize ans plus tard, en 1700, Pierre VARIGNON introduisit dans ses mémoires à l'Académie des Sciences, tous les concepts modernes absents chez NEWTON à l'aide du calcul différentiel publié par LEIBNIZ en 1684. Le texte de NEWTON transcrit par VARIGNON est toujours parfaitement compréhensible par un physicien d'aujourd'hui. Pierre VARIGNON et son travail sont quasiment inconnus (voir [44] bibliographie p. 222 pour en savoir plus). Les équations de LAGRANGE, p. 179,

$$(5.1.3) \quad \frac{\partial L}{\partial q^k} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^k} \right) = 0 = \nabla_k L - \frac{d}{dt} \left( \dot{\nabla}_k L \right)$$

deviennent

$$\frac{dp_k}{dt} = \nabla_k T - \nabla_k V, \quad (5.4.33)$$

puis

$$\frac{dP_k}{dt} - \frac{d}{dt} \left( \dot{\nabla}_k V \right) = \nabla_k T - \nabla_k V, \quad (5.4.34)$$

ensuite

$$\frac{d(M_{ki}\dot{q}^i)}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \dot{\nabla}_k V \right) - \nabla_k V + \nabla_k M_{ij}\dot{q}^i\dot{q}^j; \quad (5.4.35)$$

en nommant la force

$$F_k = \frac{d}{dt} \left( \dot{\nabla}_k V \right) - \nabla_k V \quad (5.4.36)$$

et avec le théorème 25 p. 188, la dérivée covariante de la métrique est nulle

$$\nabla_k M_{ij} = 0, \quad (5.4.37)$$

nous arrivons à une forme quasi identique à celle de NEWTON-VARIGNON

$$\frac{d(M_{ki}\dot{q}^i)}{dt} = M_{ki}\frac{d\dot{q}^i}{dt} = M_{ki}\ddot{q}^i = F_k; \quad (5.4.38)$$

../..

## 5.5 Contraintes physiques sur les mathématiques

NOUS SOUHAITONS ici lier davantage toutes les notions que nous avons vues précédemment à la réalité physique et voir les contraintes que la réalité impose en particulier à la métrique. Comme nous l'avons déjà dit, le choix d'une base revient à fixer les unités sur les axes et le choix d'une métrique revient à rendre toutes les unités commensurables. Ainsi il doit y avoir une relation entre les coordonnées de la métrique  $M_{ij}$  et les vecteurs de base  $\vec{e}_i$ .

Tout d'abord nous savons que les coefficients de la métrique doivent respecter la symétrie, p. 185 :

$$(5.3.1) \quad M_{ji} = M_{ij}, \quad \text{ou bien} \quad M_{ji}^* = M_{ij}.$$

Alors nous pouvons définir une distance à l'intérieur de l'espace, p. 185 :

$$(5.3.2) \quad (ds)^2 = M_{ij}dq^i dq^j \quad \text{ou bien} \quad (ds)^2 = M_{ij} (dq^i)^* dq^j.$$

Nous utilisons un lien entre cette distance et l'énergie afin de contraindre la métrique de l'espace que nous voulons utiliser pour rendre compte de la physique qui nous intéresse. L'énergie cinétique est, p. 191,

$$(5.4.16) \quad T = \frac{1}{2} \left( \frac{ds}{dt} \right)^2,$$

ce qui implique que nous lions les unités de la métrique à l'unité d'énergie puisque nous trouvons que

$$T = \frac{1}{2} M_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j \quad \text{ou bien} \quad T = \frac{1}{2} M_{ij} (\dot{q}^i)^* \dot{q}^j. \quad (5.5.1)$$

Mais maintenant une contrainte physique s'impose.

### PROPOSITION 14 :

L'énergie cinétique est essentiellement (au sens de l'être) positive,  $T > 0$ , donc

$$\text{quelle que soit la vitesse} \quad \vec{\dot{q}} \neq \vec{0}, \quad M_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j > 0, \quad (5.5.2)$$

ou bien

$$\text{quelle que soit la vitesse} \quad \vec{\dot{q}} \neq \vec{0}, \quad M_{ij} (\dot{q}^i)^* \dot{q}^j > 0. \quad (5.5.3)$$

~~~~~  
 Cette exigence physique de la positivité de l'énergie cinétique, nous la traduisons mathématiquement en exigeant que la métrique soit définie positive.

elle devient identique en se replaçant dans l'extension en configuration euclidienne puisque

$$q^k = x^k \quad \text{et} \quad M_{ij} = m_i \delta_{ij}, \quad (5.4.39)$$

alors

$$m_k \ddot{x}^k = F_k, \quad (5.4.40)$$

qui n'est que le deuxième principe de la mécanique de NEWTON.

THÉORÈME 27 : CRITÈRE DE JAMES SYLVESTER

En dimension d , une matrice M_{ij} réelle symétrique ou complexe hermitique est définie positive si et seulement si ses d mineurs principaux dominants²⁰ sont strictement positifs.



Le critère de SYLVESTER nous permet d'affirmer que la positivité de l'énergie cinétique implique que le déterminant M de la métrique M_{ij} est positif

$$M > 0. \tag{5.5.4}$$

Finalement le choix de la métrique sous ces contraintes physiques revient mathématiquement à munir la variété considérée d'une forme bilinéaire réelle symétrique définie positive ou bien d'une forme sesquilinéaire complexe hermitique définie positive, que l'on appelle plus brièvement produit scalaire ou produit hermitien. La norme de tout vecteur est un nombre strictement positif.

SCOLIE 7 : UNE MÉTRIQUE QUOTIDIENNE

Nous pouvons maintenant faire le lien entre les unités sur les axes et la métrique. Considérons un déplacement infime dans le plan affine tangent engendré par \vec{e}_i et \vec{e}_j . Alors seuls dq^i et dq^j sont non nuls et

$$(ds)^2 = M_{ii}(dq^i)^2 + M_{jj}(dq^j)^2 + 2M_{ij}dq^i dq^j. \tag{5.5.5}$$

Mais le fait de considérer un déplacement infime permet de remplacer la variété par l'espace affine tangent, et d'appliquer les règles de géométrie usuelle localement comme la règle de composition des déplacements vectoriels. Ainsi le déplacement $d\vec{s}$ est la somme vectorielle d'un déplacement le long de \vec{e}_i de longueur vraie $dq^i e_i$ et d'un déplacement le long de \vec{e}_j de longueur vraie $dq^j e_j$ puisque \vec{e}_i et \vec{e}_j fixent l'unité de longueur dans leur direction respective. C'est pourquoi nous pouvons écrire (sans appliquer la convention d'EINSTEIN)

$$d\vec{s} = dq^i \vec{e}_i + dq^j \vec{e}_j, \tag{5.5.6}$$

puis

$$(ds)^2 = (dq^i)^2 (e_i)^2 + (dq^j)^2 (e_j)^2 + 2dq^i dq^j \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j. \tag{5.5.7}$$

En comparant cette dernière équation à l'équation (5.5.5), nous arrivons à l'identification

$$M_{ij} = \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j \tag{5.5.8}$$

et nous voyons que les coefficients diagonaux de la métrique sont directement liés aux unités de mesure :

$$M_{ii} = (e_i)^2 \quad \text{et} \quad M_{jj} = (e_j)^2. \tag{5.5.9}$$

Mais en utilisant le critère de SYLVESTER, nous trouvons que

$$M_{ii}M_{jj} - M_{ij}^2 > 0, \quad 1 \leq i, j \leq d, \tag{5.5.10}$$

20. Un mineur principal dominant d'ordre n est le déterminant d'une sous-matrice obtenue en supprimant $d-n$ lignes et colonnes de mêmes indices. Le déterminant M est le mineur principal dominant d'ordre d .

ce qui est équivalent à

$$-1 \leq \frac{M_{ij}}{\sqrt{M_{ii}M_{jj}}} \leq 1. \quad (5.5.11)$$

En disant que les deux axes i et j ne sont pas nécessairement orthogonaux entre eux nous arrivons à une définition de l'angle entre deux axes, $\theta(\vec{e}_i, \vec{e}_j)$, en posant

$$M_{ij} = \sqrt{M_{ii}M_{jj}} \cos \theta(\vec{e}_i, \vec{e}_j). \quad (5.5.12)$$

Nous pouvons alors réexprimer le produit scalaire de deux vecteurs d'une troisième manière :

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = M_{ij}u^i v^j = uv \cos \theta(\vec{u}, \vec{v}), \quad (5.5.13)$$

après avoir introduit la notion d'angle entre les deux vecteurs au travers du cosinus

$$\cos \theta(\vec{u}, \vec{v}) = \frac{M_{ij}u^i v^j}{\sqrt{M_{ij}u^i u^j} \sqrt{M_{ij}v^i v^j}}, \quad (5.5.14)$$

qui coïncide effectivement avec la définition de l'angle ci-dessus dans le cas de deux axes de coordonnées.

Maintenant que nous avons précisé le cadre physique de l'application des mathématiques présentées ici, nous voulons encore montrer une situation commune de l'utilisation des espaces métriques. Nous reprenons le symbole g_{ij} pour la métrique. Nous venons de développer le cadre mathématique qui soutient la description physique dans divers espaces. Nous sommes arrivés à la structure d'espace métrique dans lequel la distance est mesurée par la donnée d'une métrique au travers de la formule fondamentale, p. 185,

$$(5.3.2) \quad (ds)^2 = g_{ij}dq^i dq^j,$$

qui paraît bien compliquée par rapport à la formule que nous employons dans notre espace usuel à trois dimensions, un bon vieil espace d'EUCLIDE, et qui est simplement

$$(ds)^2 = (dx)^2 + (dy)^2 + (dz)^2. \quad (5.5.15)$$

Toutefois nous savons bien que la gravité ne nous offre guère la possibilité d'exploiter pleinement les trois dimensions de notre espace puisqu'elle nous maintient constamment à la surface de la Terre, à moins qu'on soit un ange avec des ailes de douze mètres. Nous sommes donc contraints de nous déplacer à la surface de la Terre, qui présente tout un relief très intéressant. Nous nous déplaçons dans un espace à deux dimensions qui n'est pas plat ; il s'agit en fait d'une variété. Cet espace, nous le dessinons avec des cartes sur lesquelles nous précisons une échelle euclidienne et deux coordonnées géographiques, que nous notons ici x et y . Nous y indiquons également les courbes de niveau qui correspondent à la connaissance du relief. En effet, connaître les courbes de niveau signifie connaître la troisième coordonnée z en fonction de x et y :

$$z = z(x, y). \quad (5.5.16)$$

Cela nous donne immédiatement

$$dz = \frac{\partial z}{\partial x} dx + \frac{\partial z}{\partial y} dy, \quad (5.5.17)$$

puis

$$(dz)^2 = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 (dx)^2 + 2\frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial z}{\partial y} dx dy + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2 (dy)^2. \quad (5.5.18)$$

Couramment nous utilisons l'échelle pour mesurer la distance entre deux points d'une carte. Mais cette distance n'est pas en général la distance réelle à parcourir sur la surface plissée. Il ne s'agit que de la distance à vol d'ange. La distance humaine est toujours, p. 197,

$$(5.5.15) \quad (ds)^2 = (dx)^2 + (dy)^2 + (dz)^2,$$

qui devient

$$(ds)^2 = (dx)^2 + (dy)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 (dx)^2 + 2\frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial z}{\partial y} dx dy + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2 (dy)^2 \quad (5.5.19)$$

$$= \left(1 + \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2\right) (dx)^2 + 2\frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial z}{\partial y} dx dy + \left(1 + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2\right) (dy)^2 \quad (5.5.20)$$

$$= g_{xx}(dx)^2 + 2g_{xy} dx dy + g_{yy}(dy)^2. \quad (5.5.21)$$

Ainsi l'espace plissé sur lequel nous nous déplaçons est donc une variété dotée d'une métrique

$$\vec{g} = \begin{bmatrix} 1 + \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 & \frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial z}{\partial y} \\ \frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial z}{\partial y} & 1 + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2 \end{bmatrix}. \quad (5.5.22)$$

Il faut donc être attentif lors de la mesure des distances sur une carte à l'aide d'un curvimètre. Le curvimètre ne peut pas prendre en compte la métrique due au relief. Si le relief est riche et varié, la mesure obtenue est fort différente de la réalité. Cet exemple montre que la situation des espaces métriques est en fait une réalité quotidienne. ~~~~~

5.6 De LAGRANGE à HAMILTON

LE CHANGEMENT de formulation de la mécanique consiste avant tout dans le choix de nouvelles variables pertinentes. Pour William HAMILTON, ce sont les variables conjuguées. Or, lors de la formulation lagrangienne, nous avons vu que les variables naturelles du lagrangien sont (q, \dot{q}, t) ; d'où

$$(5.1.7) \quad dL = \dot{p}_i dq^i + p_i d\dot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial t} dt.$$

Nous allons donc changer de variables en utilisant la définition de l'impulsion

$$(5.1.6) \quad p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}.$$

Puis, en effectuant une transformation de LEGENDRE, nous sommes amenés à définir une nouvelle grandeur.

DÉFINITION 18 :

Nous appelons hamiltonien du système

$$H = -L + p_i \dot{q}^i. \quad (5.6.1)$$

Afin de déterminer les variables naturelles du hamiltonien, nous calculons sa différentielle :

$$dH = -dL + p_i d\dot{q}^i + \dot{q}^i dp_i \quad (5.6.2)$$

$$= -\dot{p}_i dq^i - p_i d\dot{q}^i - \frac{\partial L}{\partial t} dt + p_i d\dot{q}^i + \dot{q}^i dp_i \quad (5.6.3)$$

$$= -\dot{p}_i dq^i + \dot{q}^i dp_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (5.6.4)$$

Le hamiltonien a donc une dépendance naturelle²¹ vis-à-vis de q , de p et de t , et du même coup nous déduisons les équations de HAMILTON, qui remplacent les équations de LAGRANGE.

THÉORÈME 28 : ÉQUATIONS DE HAMILTON

$$\frac{\partial H}{\partial q^i} = -\dot{p}_i, \quad \frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}^i, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (5.6.5)$$

Nous avons une expression du lagrangien en fonction des énergies, donnée comme postulat, p. 178 :

$$(5.1.1) \quad L = T - V,$$

et nous pouvons aboutir à une expression du hamiltonien en fonction des énergies. En effet, à partir de l'équation (5.6.1), nous avons

$$\begin{aligned} H &= -L + p_i \dot{q}^i \\ &= -T + V + P_i \dot{q}^i - \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i} \dot{q}^i \end{aligned} \quad (5.6.6)$$

$$= -T + 2T + V - \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i} \dot{q}^i. \quad (5.6.7)$$

THÉORÈME 29 : EXPRESSION DU HAMILTONIEN À PARTIR DES ÉNERGIES

Le hamiltonien est la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle, diminuée de la correction des interactions non locales :

$$H = T + V - \dot{q}^i \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i} = T + v - \dot{q}^i \dot{\nabla}_i V. \quad (5.6.8)$$

21. L'espace naturel du hamiltonien n'est donc ni l'extension en configuration (q), ni l'espace des phases (q, \dot{q}). Il s'agit de l'espace (q, p). Dans cet espace, Rudolf CLAUSIUS introduisit en 1870 la grandeur appelée *viriel*, après avoir inventé l'entropie en 1865. Le viriel n'est autre que le produit scalaire $\dot{p}_i q^i$. Le viriel est utilisé en thermodynamique à travers le théorème du viriel, qui relie l'énergie cinétique moyenne des particules à leur énergie potentielle moyenne dans un système à l'équilibre thermodynamique. Le viriel ne nous est cependant d'aucune utilité ici.

La correction des interactions non locales peut être réexprimée avec l'impulsion

$$\dot{q}^i \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i} = M^{ij} P_j \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i} \quad (5.6.9)$$

$$= M^{ij} \left(p_j + \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^j} \right) \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i} \quad (5.6.10)$$

$$= M^{ij} p_j \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i} + M^{ij} \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i} \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^j}. \quad (5.6.11)$$

Dans cette dernière expression, nous reconnaissons les énergies potentielles vecteur et tenseur des définitions 16 p. 193 et 17 p. 194 :

$$\dot{q}^i \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i} = -V_{\text{vec}} - 2V_{\text{ten}}. \quad (5.6.12)$$

Comme par ailleurs, nous avons introduit dans la définition 15 p. 193 une énergie cinétique effective fonction de l'impulsion

$$(5.4.29) \quad T_{\text{eff}} = \frac{1}{2} M^{ij} p_i p_j$$

et puisque, p. 194,

$$(5.4.32) \quad T = T_{\text{eff}} - V_{\text{vec}} - V_{\text{ten}},$$

nous obtenons une autre expression du hamiltonien. En effet, à partir de l'équation (5.6.8) p. 199

$$\begin{aligned} H &= T + V - \dot{q}^i \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i} \\ &= T_{\text{eff}} - V_{\text{vec}} - V_{\text{ten}} + V - (-V_{\text{vec}} - 2V_{\text{ten}}) \end{aligned} \quad (5.6.13)$$

$$= T_{\text{eff}} + V + V_{\text{ten}}. \quad (5.6.14)$$

THÉORÈME 30 : EXPRESSION DU HAMILTONIEN À PARTIR DES ÉNERGIES EFFECTIVES
Le hamiltonien est la somme de l'énergie cinétique effective et de l'énergie potentielle effective :

$$H = T_{\text{eff}} + V_{\text{eff}} \quad (5.6.15)$$

$$T_{\text{eff}} = \frac{1}{2} M^{ij} p_i p_j \quad (5.6.16)$$

et

$$V_{\text{eff}} = V + V_{\text{ten}} = V - \frac{1}{2} M^{ij} \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^i} \frac{\partial V}{\partial \dot{q}^j} = V - \frac{1}{2} M^{ij} \dot{\nabla}_i V \dot{\nabla}_j V. \quad (5.6.17)$$

De cette manière nous interprétons le hamiltonien comme l'énergie du système en mouvement.

Le mouvement du système est donc totalement régi par les équations de HAMILTON déduites du principe de moindre action. Néanmoins l'action apparaît comme une métagrاندeur sans réelle signification. Le travail de Carl JACOBI a montré que le mouvement du système peut directement être donné à partir d'une équation régissant l'action S .

5.7 L'équation de HAMILTON-JACOBI

NOUS REPRENONS la définition de l'action donnée dans le principe de moindre action pour le mouvement de la position $q_0 = q(t_0)$ à la position $q' = q(t')$, p. 178,

$$(5.1.2) \quad S = \int_{t_0}^{t'} dt L.$$

Mais au lieu de considérer l'action comme donnée pour le mouvement, nous pouvons envisager l'action qui s'actualise à chaque instant. L'action est alors une fonction de la position et de la date actuelles pour une certaine condition initiale. Le hamiltonien nous permet d'établir cette dépendance de l'action puisque, p. 199,

$$(5.6.1) \quad H = -L + p_i \dot{q}^i,$$

donc

$$dS = dt L = dt \dot{q}^i p_i - dt H = dq^i p_i - dt H. \quad (5.7.1)$$

Les variables naturelles de l'action sont q et t , et

$$\frac{\partial S}{\partial q^i} = p_i \quad \text{ou bien} \quad \nabla_i S = p_i \quad (5.7.2)$$

et

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H. \quad (5.7.3)$$

Ces résultats nous permettent d'en déduire l'équation que doit satisfaire l'action au cours du mouvement.

THÉORÈME 31 : ÉQUATION DE HAMILTON-JACOBI

L'action S du système en mouvement est solution de l'équation

$$\frac{\partial S}{\partial t}(q, t) + H(q, \nabla S, t) = 0. \quad (5.7.4)$$

~~~~~

C'est l'équation de HAMILTON-JACOBI qui va déboucher sur le passage à la mécanique quantique. Nous allons donc construire l'équation de SCHRÖDINGER dans un espace bien différent de celui dans lequel on la rencontre habituellement.



## Annexes du chapitre 5



## Annexe A<sub>5</sub>

# Réellification d'une variété complexe

La loi de transformation donnée dans la définition 10 p. 182 est valable dans  $\mathbb{R}$  ou dans  $\mathbb{C}$ , mais dans  $\mathbb{C}$ , il en existe bien d'autres qui incluent la possibilité d'utiliser la conjugaison complexe des dérivées partielles de la loi de changement de coordonnées. Par exemple

$$\tilde{g}_{k\ell} = \left( \frac{\partial q^i}{\partial \tilde{q}^k} \right)^* \frac{\partial q^j}{\partial \tilde{q}^\ell} g_{ij}, \quad (\text{A}_{5.1})$$

ou bien

$$\tilde{g}_{k\ell} = \frac{\partial q^i}{\partial \tilde{q}^k} \left( \frac{\partial q^j}{\partial \tilde{q}^\ell} \right)^* g_{ij}, \quad (\text{A}_{5.2})$$

ou encore

$$\tilde{g}_{k\ell} = \left( \frac{\partial q^i}{\partial \tilde{q}^k} \right)^* \left( \frac{\partial q^j}{\partial \tilde{q}^\ell} \right)^* g_{ij}, \quad (\text{A}_{5.3})$$

qui, dans une variété réelle, redeviennent toutes identiques à la loi ordinaire

$$\tilde{g}_{k\ell} = \frac{\partial q^i}{\partial \tilde{q}^k} \frac{\partial q^j}{\partial \tilde{q}^\ell} g_{ij}. \quad (\text{A}_{5.4})$$

Mais le cas des variétés complexes est en fait très exigeant. Pour les variétés réelles, nous exigeons seulement que les changements de coordonnées soient admissibles, c'est-à-dire que le jacobien de  $\tilde{q} = \tilde{q}(q)$  ne soit jamais nul. Pour les variétés complexes, il faut remarquer que  $\tilde{q} = \tilde{q}(q)$  correspond à la donnée de fonctions complexes de variables complexes dont nous voulons utiliser les dérivées partielles dans les lois de transformation (A<sub>5.1</sub>), (A<sub>5.2</sub>), (A<sub>5.3</sub>) et (A<sub>5.4</sub>). Or, pour que la dérivation par rapport à une variable complexe ait une signification, la fonction doit respecter les conditions de CAUCHY-RIEMANN, c'est-à-dire que la fonction doit être holomorphe. Cependant, nous n'avons aucune garantie que les fonctions en usage dans la physique soient nécessairement holomorphes. Heureusement ces conditions très exigeantes peuvent être évitées en réellifiant la variété complexe. Nous utilisons l'identification de  $\mathbb{C}$  à  $\mathbb{R}^2$ , et alors une variété complexe de dimension  $d$  est associée à une variété réelle de dimension  $2d$ . Pour cela, nous écrivons la décomposition des coordonnées en partie réelle et partie imaginaire :

$$q^i = \text{Re } q^i + i \text{Im } q^i \quad \text{avec } 1 \leq i \leq d \quad (\text{A}_{5.5})$$

et

$$\tilde{q}^k = \operatorname{Re} \tilde{q}^k + i \operatorname{Im} \tilde{q}^k \quad \text{avec} \quad 1 \leq k \leq d. \quad (\text{A}_5.6)$$

Nous posons

$$\mathbf{q}^i = \operatorname{Re} q^i \quad \text{avec} \quad 1 \leq i \leq d \quad (\text{A}_5.7)$$

et

$$\tilde{\mathbf{q}}^k = \operatorname{Re} \tilde{q}^k \quad \text{avec} \quad 1 \leq k \leq d, \quad (\text{A}_5.8)$$

et afin de doubler la dimension, nous écrivons

$$\mathbf{q}^{\bar{i}} = \operatorname{Im} q^i \quad \text{avec} \quad \bar{i} = i + d \quad (\text{A}_5.9)$$

et

$$\tilde{\mathbf{q}}^{\bar{k}} = \operatorname{Im} \tilde{q}^k \quad \text{avec} \quad \bar{k} = k + d. \quad (\text{A}_5.10)$$

Alors

$$q^i = \mathbf{q}^i + i \mathbf{q}^{\bar{i}} \quad (\text{A}_5.11)$$

et

$$\tilde{q}^k = \tilde{\mathbf{q}}^k + i \tilde{\mathbf{q}}^{\bar{k}}, \quad (\text{A}_5.12)$$

et

$$\tilde{q}^k = \tilde{q}^k(q^1, \dots, q^d) \quad \text{avec} \quad 1 \leq k \leq d \quad (\text{A}_5.13)$$

devient

$$\tilde{\mathbf{q}}^k = \tilde{\mathbf{q}}^k(\mathbf{q}^1, \dots, \mathbf{q}^d, \mathbf{q}^{\bar{1}}, \dots, \mathbf{q}^{\bar{d}}) \quad \text{avec} \quad 1 \leq k \leq 2d. \quad (\text{A}_5.14)$$

À partir de maintenant la variété est réellifiée et l'unique loi de transformation qui s'applique est celle des variétés réelles données dans la définition 10 p. 182. Cependant les champs de tenseurs peuvent encore être complexes, c'est-à-dire des fonctions complexes de variables réelles.

## Annexe B<sub>5</sub>

# Connexion dans l'espace et dérivée covariante

Nous nous plaçons dans une variété réelle de dimension  $d$  (ou une variété complexe réellifiée de dimension  $2d$ ) et nous avons des champs de tenseurs dont les coordonnées sont des fonctions du point dans l'espace. Dans cette variété, nous voulons réaliser des opérations différentielles qui consistent à comparer un champ de tenseurs en deux points infiniment voisins. Les vecteurs (scalaires et tenseurs également) sont des objets définis de manière intrinsèque, c'est-à-dire indépendamment de toute base ou convention de repérage dans l'espace. Aussi il est utile de pouvoir désigner un vecteur avec une notation également intrinsèque, c'est-à-dire qui ne fait référence à aucune base. Cependant, la notation intrinsèque n'est pas habituelle. Par conséquent, nous allons l'utiliser très transitoirement. Un vecteur contravariant est noté  $\vec{v}$  et il s'exprime avec ses coordonnées  $v^i$ , nécessairement contravariantes, dans une base elle aussi contravariante  $\{\vec{e}_i\}$  :

$$\vec{v} = v^i \vec{e}_i. \quad (\text{B}_5.1)$$

Un vecteur covariant est noté  $\vec{w}$  et il s'exprime avec ses coordonnées covariantes  $w_j$  dans une base covariante  $\{\vec{e}^j\}$  :

$$\vec{w} = w_j \vec{e}^j. \quad (\text{B}_5.2)$$

Les bases covariante et contravariante sont reliées par la dualité

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}^j = \delta_i^j. \quad (\text{B}_5.3)$$

Considérons, pour commencer, un champ de vecteurs contravariants  $\vec{v}$  en  $q^\ell$  et en  $q^\ell + dq^\ell$ . Ces deux vecteurs diffèrent par leurs coordonnées mais les bases entre les deux points infiniment voisins sont également différentes :

$$\vec{v}(q^\ell) = v^i(q^\ell) \vec{e}_i(q^\ell) \quad (\text{B}_5.4)$$

et

$$\vec{v}(q^\ell + dq^\ell) = v^i(q^\ell + dq^\ell) \vec{e}_i(q^\ell + dq^\ell) \quad (\text{B}_5.5)$$

$$\approx (v^i(q^\ell) + dv^i(q^\ell)) (\vec{e}_i(q^\ell) + d\vec{e}_i(q^\ell)) \quad (\text{B}_5.6)$$

$$\approx v^i(q^\ell) \vec{e}_i(q^\ell) + d\vec{v}(q^\ell), \quad (\text{B}_5.7)$$

avec

$$d\vec{v} = dv^i \vec{e}_i + v^i d\vec{e}_i. \quad (\text{B}_5.8)$$

Nous voyons immédiatement que les  $\{dv^i\}$  ne sont pas les coordonnées du vecteur contravariant  $d\vec{v}$ . Les opérations différentielles ne bénéficient pas à ce stade d'une définition intrinsèque comme nous le souhaiterions. En effet, une dérivée partielle d'un champ de tenseurs n'est pas un champ de tenseurs. Pour qu'il en soit effectivement ainsi, nous devons doter la variété d'une connexion, c'est-à-dire d'une règle de différentiation des vecteurs de base, afin de pouvoir connecter les points de l'espace entre eux. Cette règle nous permet le transport parallèle de la base  $\{\vec{e}_i\}$  de  $q^\ell$  en  $q^\ell + dq^\ell$  afin de réaliser la comparaison des tenseurs. La connexion est une donnée externe, nous devons l'ajouter aux définitions de l'espace. Nous exprimons la connexion en écrivant

$$d\vec{e}_i = \vec{e}_j \Gamma_{ik}^j dq^k, \quad (\text{B}_5.9)$$

qui est l'expression des  $d\vec{e}_i$  dans la base  $\{\vec{e}_j\}$ . Les  $\Gamma_{ik}^j$  sont les symboles d'Elwin CHRISTOFFEL, qui définissent la connexion des points entre eux, assurant ainsi la transportabilité dans l'espace. Cette écriture nous amène à

$$\frac{\partial \vec{e}_i}{\partial q^k} = \vec{e}_j \Gamma_{ik}^j, \quad (\text{B}_5.10)$$

puis avec

$$\vec{e}_\ell \cdot \vec{e}^j = \delta_\ell^j, \quad (\text{B}_5.11)$$

nous obtenons

$$\Gamma_{ik}^j = \frac{\partial \vec{e}_i}{\partial q^k} \cdot \vec{e}^j. \quad (\text{B}_5.12)$$

Nous arrivons alors à écrire

$$d\vec{v} = dv^i \vec{e}_i + \vec{e}_j \Gamma_{ik}^j dq^k v^i \quad (\text{B}_5.13)$$

$$= \frac{\partial v^i}{\partial q^k} dq^k \vec{e}_i + \vec{e}_i \Gamma_{jk}^i dq^k v^j, \quad (\text{B}_5.14)$$

et finalement

$$d\vec{v} = dq^k \nabla_k v^i \vec{e}_i, \quad (\text{B}_5.15)$$

en définissant la dérivée covariante du vecteur contravariant

$$\nabla_k v^i = \frac{\partial v^i}{\partial q^k} + \Gamma_{jk}^i v^j. \quad (\text{B}_5.16)$$

La dérivée covariante d'un vecteur contravariant est un tenseur de rang  $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ . Le premier terme de cette dérivée correspond à la variation propre au vecteur, et le second terme à la variation propre à la base. La dérivée covariante est construite pour avoir la propriété d'invariance que la dérivée partielle ne possède pas. Cela impose alors la loi de transformation des symboles de CHRISTOFFEL, et on peut montrer que

$$\tilde{\Gamma}_{mn}^\ell = \Gamma_{jk}^i \frac{\partial \tilde{q}^\ell}{\partial q^i} \frac{\partial q^j}{\partial \tilde{q}^m} \frac{\partial q^k}{\partial \tilde{q}^n} + \frac{\partial \tilde{q}^\ell}{\partial q^h} \frac{\partial^2 q^h}{\partial \tilde{q}^m \partial \tilde{q}^n}, \quad (\text{B}_5.17)$$



qui nous prouve le caractère non tensoriel des symboles de CHRISTOFFEL. Cela est dû à ce qu'ils sont attachés à deux points de l'espace. La formule de transformation des symboles de CHRISTOFFEL nous montre qu'ils permettent de construire un tenseur en remarquant que les coordonnées satisfont à la relation

$$\frac{\partial^2 q^h}{\partial \tilde{q}^m \partial \tilde{q}^n} = \frac{\partial^2 q^h}{\partial \tilde{q}^n \partial \tilde{q}^m}. \quad (\text{B}_5.18)$$

Ainsi la torsion définie par

$$\Theta_{jk}^i = \Gamma_{jk}^i - \Gamma_{kj}^i \quad (\text{B}_5.19)$$

est bien un tenseur de rang  $\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$ . La torsion doit être donnée par une théorie externe à celle de la géométrie différentielle en même temps que la connexion.

La dérivée covariante d'un scalaire s'identifie simplement à la dérivation partielle

$$\nabla_k f = \frac{\partial f}{\partial q^k}, \quad (\text{B}_5.20)$$

car il est possible de vérifier que la dérivée partielle d'une fonction a bien les propriétés d'un vecteur.

Les propriétés vis-à-vis de la linéarité et la règle de LEIBNIZ sur le produit sont identiques à celles de la dérivation usuelle. Nous allons utiliser ce fait pour en déduire la dérivée covariante d'un vecteur covariant. Posons

$$f = u^i v_i. \quad (\text{B}_5.21)$$

Alors

$$\nabla_k f = \frac{\partial f}{\partial q^k} = \frac{\partial(u^i v_i)}{\partial q^k} = \frac{\partial u^i}{\partial q^k} v_i + u^i \frac{\partial v_i}{\partial q^k}. \quad (\text{B}_5.22)$$

Mais

$$\nabla_k u^i = \frac{\partial u^i}{\partial q^k} + \Gamma_{jk}^i u^j, \quad (\text{B}_5.23)$$

donc

$$\nabla_k f = (\nabla_k u^i) v_i - \Gamma_{jk}^i u^j v_i + u^i \frac{\partial v_i}{\partial q^k}. \quad (\text{B}_5.24)$$

Or,

$$\nabla_k f = \nabla_k(u^i v_i) = (\nabla_k u^i) v_i + u^i (\nabla_k v_i). \quad (\text{B}_5.25)$$

Par conséquent

$$\nabla_k v_i = \frac{\partial v_i}{\partial q^k} - \Gamma_{ik}^j v_j. \quad (\text{B}_5.26)$$

Nous pouvons ensuite généraliser la dérivée covariante, à l'aide du produit tensoriel, à tous les rangs de tenseurs et de pseudotenseurs, ce qui nous conduit aux théorèmes 21 et 22 p. 184.

## Transport des tenseurs et courbure

Nous avons donc acquis la possibilité du transport dans l'espace. Une manière de le comprendre est de considérer le transport d'un étalon formé par un scalaire  $L$ , que nous pouvons appeler le mètre. Lors du transport parallèle, par définition, la dérivée covariante de  $L$  est nulle. Or, pour un scalaire, elle s'identifie à la dérivation partielle et donc

$$\nabla_k L = \frac{\partial L}{\partial q^k} = 0. \quad (\text{B}_5.27)$$

C'est pourquoi, quel que soit le chemin sur lequel a lieu le transport parallèle, le scalaire ne varie pas. Le mètre est donc transportable, mais il n'est toujours pas orientable. Toutefois nous devons modérer notre enthousiasme car cela n'est pas forcément vrai pour les tenseurs de rang plus élevé.

Considérons un vecteur contravariant  $\vec{v}$ . Effectuons-en un transport parallèle sur une boucle  $\partial S$  support d'une surface  $S$ . Par définition du transport parallèle

$$\nabla_k v^i = \frac{\partial v^i}{\partial q^k} + \Gamma_{jk}^i v^j = 0 \quad (\text{B}_5.28)$$

et

$$\oint_{\partial S} dq^k \frac{\partial v^i}{\partial q^k} = - \oint_{\partial S} dq^k \Gamma_{jk}^i v^j. \quad (\text{B}_5.29)$$

Nous utilisons le théorème de STOKES

$$\oint_{\partial S} dq^k \frac{\partial v^i}{\partial q^k} = -\frac{1}{2} \iint_S dq^k dq^\ell \left[ \frac{\partial (\Gamma_{j\ell}^i v^j)}{\partial q^k} - \frac{\partial (\Gamma_{jk}^i v^j)}{\partial q^\ell} \right] \quad (\text{B}_5.30)$$

$$= -\frac{1}{2} \iint_S dq^k dq^\ell \left[ \frac{\partial \Gamma_{j\ell}^i}{\partial q^k} v^j - \frac{\partial \Gamma_{jk}^i}{\partial q^\ell} v^j + \Gamma_{j\ell}^i \frac{\partial v^j}{\partial q^k} - \Gamma_{jk}^i \frac{\partial v^j}{\partial q^\ell} \right]. \quad (\text{B}_5.31)$$

Or, puisque la dérivée covariante est nulle

$$\frac{\partial v^j}{\partial q^k} = -\Gamma_{hk}^j v^h \quad \text{et} \quad \frac{\partial v^j}{\partial q^\ell} = -\Gamma_{h\ell}^j v^h, \quad (\text{B}_5.32)$$

donc

$$\oint_{\partial S} dq^k \frac{\partial v^i}{\partial q^k} = -\frac{1}{2} \iint_S dq^k dq^\ell \left[ \frac{\partial \Gamma_{j\ell}^i}{\partial q^k} v^j - \frac{\partial \Gamma_{jk}^i}{\partial q^\ell} v^j - \Gamma_{j\ell}^i \Gamma_{hk}^j v^h + \Gamma_{jk}^i \Gamma_{h\ell}^j v^h \right] \quad (\text{B}_5.33)$$

$$= -\frac{1}{2} \iint_S dq^k dq^\ell \left[ \frac{\partial \Gamma_{j\ell}^i}{\partial q^k} - \frac{\partial \Gamma_{jk}^i}{\partial q^\ell} - \Gamma_{h\ell}^i \Gamma_{jk}^h + \Gamma_{hk}^i \Gamma_{j\ell}^h \right] v^j, \quad (\text{B}_5.34)$$

d'où en introduisant la courbure, tenseur de rang  $\begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}$ ,

$$R_{jkl}^i = \frac{\partial \Gamma_{j\ell}^i}{\partial q^k} - \frac{\partial \Gamma_{jk}^i}{\partial q^\ell} - \Gamma_{h\ell}^i \Gamma_{jk}^h + \Gamma_{hk}^i \Gamma_{j\ell}^h, \quad (\text{B}_5.35)$$

nous obtenons une variation non nulle du vecteur contravariant

$$\delta v^i = \oint_{\partial S} dq^k \frac{\partial v^i}{\partial q^k} = -\frac{1}{2} \iint_S dq^k dq^\ell R_{jkl}^i v^j. \quad (\text{B}_5.36)$$

La connexion provoque donc une courbure qui altère les tenseurs lors de leur transport parallèle, à l'exception importante des scalaires. D'une manière générale, pour un tenseur de rang  $\begin{bmatrix} m \\ n \end{bmatrix}$  non nul,

$$\delta T_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_m} = -\frac{1}{2} \iint_S dq^k dq^\ell \left[ \sum_{p=1}^m R_{hkl}^{i_p} T_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_{p-1} h i_{p+1} \dots i_m} - \sum_{p=1}^n R_{j_p k \ell}^h T_{j_1 \dots j_{p-1} h j_{p+1} \dots j_n}^{i_1 \dots i_m} \right] \neq 0. \quad (\text{B}_5.37)$$

Un autre effet de la courbure est d'interdire la commutativité des dérivées puisqu'avec le théorème de STOKES,

$$\delta v^i = \oint_{\partial S} dq^k \frac{\partial v^i}{\partial q^k} = \iint_S dq^k dq^\ell \left[ \frac{\partial^2 v^i}{\partial q^k \partial q^\ell} - \frac{\partial^2 v^i}{\partial q^\ell \partial q^k} \right], \quad (\text{B}_5.38)$$

donc

$$\frac{\partial^2 v^i}{\partial q^k \partial q^\ell} - \frac{\partial^2 v^i}{\partial q^\ell \partial q^k} = R_{jkl}^i v^j, \quad (\text{B}_5.39)$$

et, pour les dérivées covariantes, nous pouvons montrer que

$$\nabla_k \nabla_\ell v^i - \nabla_\ell \nabla_k v^i = R_{jkl}^i v^j + \Theta_{kl}^j \nabla_j v^i. \quad (\text{B}_5.40)$$

En munissant les variétés d'une connexion, nous les avons également affectées d'une torsion et d'une courbure. La mesure des distances y est cependant toujours impossible.



## Annexe C<sub>5</sub>

# Métrie de l'espace et dérivée covariante

Le fait d'être, à présent, plongés dans un espace métrique nous permet de relier covariance et contravariance. Dans ce contexte, nous ne parlons plus de vecteur covariant ou contravariant mais des coordonnées covariantes ou contravariantes d'un vecteur. C'est la métrique  $g_{ij}$  qui permet d'effectuer ce passage entre l'espace et son dual. Nous partons d'un vecteur contravariant  $v^i$  et nous définissons ses coordonnées covariantes par la contraction avec la métrique

$$v_j = g_{ij}v^i. \quad (\text{C}_5.1)$$

Ce genre de relation nous permet donc de transformer des coordonnées contravariantes pour n'importe quel tenseur ayant au moins un indice contravariant ; par exemple  $t_i^k$  devient

$$t_{ij} = g_{jk}t_i^k. \quad (\text{C}_5.2)$$

Naturellement nous cherchons à avoir une relation réciproque, ce qui est possible en introduisant les coordonnées contravariantes  $g^{ij}$  de la métrique, qui permettent d'écrire

$$v^i = g^{ij}v_j. \quad (\text{C}_5.3)$$

Pour trouver le lien entre  $g_{ij}$  et  $g^{ij}$  nous composons les deux transformations l'une à la suite de l'autre, et cela doit laisser les coordonnées contravariantes ou covariantes inchangées :

$$v^i = g^{ij}v_j = g^{ij}g_{jk}v^k, \quad (\text{C}_5.4)$$

et nous en déduisons nécessairement que

$$g^{ij}g_{jk} = \delta_k^i = g_k^i. \quad (\text{C}_5.5)$$

Le tableau des  $g^{ij}$  est donc l'inverse au sens matriciel du tableau des  $g_{ij}$ , ce que nous écrivons

$$g^{ij} = \frac{\text{cof } g_{ji}}{g}, \quad (\text{C}_5.6)$$

où

$$g = \det[g_{mn}]_{\substack{1 \leq m \leq d \\ 1 \leq n \leq d}}, \quad (\text{C}_5.7)$$

et  $\text{cof}g_{ji}$  est le cofacteur de la ligne  $j$  et de la colonne  $i$  de la matrice associée au tenseur  $g_{ij}$ . Il s'agit du déterminant d'ordre  $d - 1$  obtenu en supprimant la ligne  $j$  et la colonne  $i$ , et multiplié par  $(-1)^{i+j}$

$$\text{cof}g_{ji} = (-1)^{i+j} \det[g_{mn}]_{\substack{1 \leq m \neq j \leq d \\ 1 \leq n \neq i \leq d}}. \quad (\text{C}_5.8)$$

Le passage de la contravariance à la covariance existe aussi pour les vecteurs de base puisque

$$\vec{v} = v_j \vec{e}^j = g_{ij} v^i \vec{e}^j = v^i \vec{e}_i = \vec{v}, \quad (\text{C}_5.9)$$

avec la relation

$$\vec{e}_i = g_{ij} \vec{e}^j \quad (\text{C}_5.10)$$

et son inverse

$$\vec{e}^i = g^{ij} \vec{e}_j. \quad (\text{C}_5.11)$$

Mais en fait nous venons de voir qu'il n'y a plus d'étanchéité entre covariance et contravariance, c'est pourquoi nous pouvons revenir à une notation plus simple

$$\vec{v} = \vec{v} = \vec{v} \quad (\text{C}_5.12)$$

et

$$\vec{e}_i = \vec{e}_i, \quad \vec{e}^i = \vec{e}^i. \quad (\text{C}_5.13)$$

Nous pouvons alors réécrire le produit scalaire entre deux vecteurs. Initialement, il est défini par

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = u^i v_i, \quad (\text{C}_5.14)$$

mais, avec la métrique, nous pouvons maintenant écrire une nouvelle définition, la définition 12 p. 186 :

$$(5.3.6) \quad \vec{u} \cdot \vec{v} = u^i v_i = g_{ij} u^i v^j = g^{ij} u_i v_j = u_i v^i.$$

La structure d'espace métrique, de dimension  $d$ , nous permet de relier les symboles de CHRISTOFFEL à la métrique. À partir de leur définition avec l'équation (B5.12) p. 208

$$\Gamma_{jk}^i = \vec{e}^i \cdot \frac{\partial \vec{e}_j}{\partial q^k} \quad (\text{C}_5.15)$$

et en passant de la base covariante à la base contravariante avec l'équation (C5.11), basculée dans la notation habituelle des vecteurs,

$$\vec{e}^i = g^{i\ell} \vec{e}_\ell, \quad (\text{C}_5.16)$$

nous trouvons

$$\Gamma_{jk}^i = g^{i\ell} \vec{e}_\ell \cdot \frac{\partial \vec{e}_j}{\partial q^k}. \quad (\text{C}_5.17)$$

Or,

$$\vec{e}_\ell \cdot \frac{\partial \vec{e}_j}{\partial q^k} = \frac{\partial(\vec{e}_\ell \cdot \vec{e}_j)}{\partial q^k} - \vec{e}_k \cdot \frac{\partial \vec{e}_\ell}{\partial q^k} \quad (\text{C}_5.18)$$

$$= \frac{\partial(\vec{e}_\ell \cdot \vec{e}_j)}{\partial q^k} - g_{jm} \vec{e}^m \cdot \frac{\partial \vec{e}_\ell}{\partial q^k} \quad (\text{C}_5.19)$$

$$= \frac{\partial g_{\ell j}}{\partial q^k} - g_{jm} \Gamma_{\ell k}^m, \quad (\text{C}_5.20)$$

donc

$$\Gamma_{jk}^i = g^{i\ell} \frac{\partial g_{\ell j}}{\partial q^k} - g^{i\ell} g_{jm} \Gamma_{\ell k}^m, \quad (\text{C}_5.21)$$

puis

$$g_{ni} \Gamma_{jk}^i = g_{ni} g^{i\ell} \frac{\partial g_{\ell j}}{\partial q^k} - g_{ni} g^{i\ell} g_{jm} \Gamma_{\ell k}^m \quad (\text{C}_5.22)$$

$$= \delta_n^\ell \frac{\partial g_{\ell j}}{\partial q^k} - \delta_n^\ell g_{jm} \Gamma_{\ell k}^m, \quad (\text{C}_5.23)$$

donc

$$g_{ni} \Gamma_{jk}^i = \frac{\partial g_{nj}}{\partial q^k} - g_{jm} \Gamma_{nk}^m. \quad (\text{C}_5.24)$$

Par conséquent

$$\frac{\partial g_{nj}}{\partial q^k} = g_{ni} \Gamma_{jk}^i + g_{jm} \Gamma_{nk}^m. \quad (\text{C}_5.25)$$

Nous pouvons alors combiner les dérivées de la métrique pour isoler le symbole de CHRISTOFFEL. En utilisant la torsion définie dans (B<sub>5</sub>.19) p. 209,  $\Theta_{jk}^i = \Gamma_{jk}^i - \Gamma_{kj}^i$ ,

$$\frac{\partial g_{nj}}{\partial q^k} + \frac{\partial g_{kj}}{\partial q^n} - \frac{\partial g_{nk}}{\partial q^j} = g_{jm} (\Gamma_{nk}^m + \Gamma_{kn}^m) + g_{ni} \Theta_{jk}^i + g_{ki} \Theta_{jn}^i. \quad (\text{C}_5.26)$$

Nous voyons que nous allons en déduire une somme de deux symboles de CHRISTOFFEL dont la différence correspond par ailleurs à la torsion. Subséquemment nous obtenons l'expression du symbole de CHRISTOFFEL en fonction de la métrique et de la torsion :

$$g_{jm} (\Gamma_{nk}^m + \Gamma_{kn}^m) = \frac{\partial g_{nj}}{\partial q^k} + \frac{\partial g_{kj}}{\partial q^n} - \frac{\partial g_{nk}}{\partial q^j} - g_{ni} \Theta_{jk}^i - g_{ki} \Theta_{jn}^i; \quad (\text{C}_5.27)$$

alors

$$\Gamma_{nk}^m + \Gamma_{kn}^m = g^{mj} \left[ \frac{\partial g_{nj}}{\partial q^k} + \frac{\partial g_{kj}}{\partial q^n} - \frac{\partial g_{nk}}{\partial q^j} - g_{ni} \Theta_{jk}^i - g_{ki} \Theta_{jn}^i \right], \quad (\text{C}_5.28)$$

et avec la torsion

$$\Gamma_{nk}^m - \Gamma_{kn}^m = \Theta_{nk}^m, \quad (\text{C}_5.29)$$

cela nous permet d'en déduire que

$$\Gamma_{nk}^m = \frac{g^{mj}}{2} \left[ \frac{\partial g_{nj}}{\partial q^k} + \frac{\partial g_{kj}}{\partial q^n} - \frac{\partial g_{nk}}{\partial q^j} - g_{ni} \Theta_{jk}^i - g_{ki} \Theta_{jn}^i \right] + \frac{\Theta_{nk}^m}{2}. \quad (\text{C}_5.30)$$

Du point de vue mathématique, la connexion est plus primitive que la métrique et la torsion, mais du point de vue physique, ce sont la métrique et la torsion qui sont reliées à des grandeurs physiques concrètes et locales.

## Cas des variétés complexes réellifiées

Dans le cas d'une variété complexe, la métrique peut être introduite avant la réellification de la variété. La métrique doit être hermitique. Mais la connexion ne peut pas toujours être définie (pour cause de fonction non holomorphe). Il faut alors réellifier la variété et déterminer la métrique de la variété réellifiée à partir de la métrique de la variété complexe. Pour cela, nous partons de la proposition 13 p. 185 :

$$(5.3.2) \quad (ds)^2 = g_{ij} (dq^i)^* dq^j,$$

et nous décomposons les coordonnées en parties réelle et imaginaire :

$$dq^i = d\mathbf{q}^i + i d\mathbf{q}^{i+d} \quad \text{et} \quad dq^j = d\mathbf{q}^j + i d\mathbf{q}^{j+d}. \quad (C_5.31)$$

L'équation (5.3.2) devient

$$(ds)^2 = g_{ij} (d\mathbf{q}^i d\mathbf{q}^j + d\mathbf{q}^{i+d} d\mathbf{q}^{j+d} + i d\mathbf{q}^i d\mathbf{q}^{j+d} - i d\mathbf{q}^{i+d} d\mathbf{q}^j), \quad (C_5.32)$$

et nous posons

$$\mathbf{g}_{ij} = g_{ij} \quad (C_5.33)$$

$$\mathbf{g}_{i\,j+d} = i g_{ij} \quad (C_5.34)$$

$$\mathbf{g}_{i+d\,j} = -i g_{ij} \quad (C_5.35)$$

$$\mathbf{g}_{i+d\,j+d} = g_{ij}. \quad (C_5.36)$$

La métrique de la variété réellifiée est  $\mathbf{g}_{ij}$ , elle est complexe et hermitique. À partir de là, la définition d'une connexion est possible et tout reprend son cours ordinaire.

## Dérivée covariante de la métrique

Nous venons de le voir, la métrique et la connexion ne sont pas indépendantes. Il y a donc lieu d'examiner la dérivée covariante de la métrique que nous exprimons de trois manières équivalentes : covariante, contravariante et mixte. Commençons par la métrique covariante  $g_{ij}$

$$\nabla_k g_{ij} = \frac{\partial g_{ij}}{\partial q^k} - \Gamma_{ik}^\ell g_{\ell j} - \Gamma_{jk}^\ell g_{i\ell}. \quad (C_5.37)$$

Nous utilisons l'expression des symboles de CHRISTOFFEL (C<sub>5</sub>.30) pour aboutir à

$$\Gamma_{ik}^\ell g_{\ell j} = g_{\ell j} \frac{g^{\ell h}}{2} \left[ \frac{\partial g_{ih}}{\partial q^k} + \frac{\partial g_{kh}}{\partial q^i} - \frac{\partial g_{ik}}{\partial q^h} - g_{im} \Theta_{hk}^m - g_{km} \Theta_{hi}^m \right] + \frac{\Theta_{ik}^\ell}{2} g_{\ell j}, \quad (C_5.38)$$

et puisque

$$g_{\ell j} g^{\ell h} = \delta_j^h, \quad (C_5.39)$$

alors

$$\Gamma_{ik}^\ell g_{\ell j} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial g_{ij}}{\partial q^k} + \frac{\partial g_{kj}}{\partial q^i} - \frac{\partial g_{ik}}{\partial q^j} - g_{im} \Theta_{jk}^m - g_{km} \Theta_{ji}^m \right] + \frac{\Theta_{ik}^\ell}{2} g_{\ell j} \quad (C_5.40)$$



et

$$\Gamma_{jk}^\ell g_{i\ell} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial g_{ji}}{\partial q^k} + \frac{\partial g_{ki}}{\partial q^j} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial q^i} - g_{jm} \Theta_{ik}^m - g_{km} \Theta_{ij}^m \right] + \frac{\Theta_{jk}^\ell}{2} g_{i\ell}. \quad (\text{C}_5.41)$$

Il est alors clair que

$$\Gamma_{ik}^\ell g_{\ell j} + \Gamma_{jk}^\ell g_{i\ell} = \frac{\partial g_{ij}}{\partial q^k}, \quad (\text{C}_5.42)$$

et finalement l'équation (C<sub>5.37</sub>) p. 216 devient

$$(5.3.18) \quad \nabla_k g_{ij} = 0.$$

Pour la métrique mixte  $g_\ell^i = g^{ik} g_{k\ell} = \delta_\ell^i$ , nous savons qu'elle se réduit simplement au symbole de KRONECKER et par conséquent sa dérivée covariante est nulle

$$\nabla_k \delta_\ell^i = \frac{\partial \delta_\ell^i}{\partial q^k} + \Gamma_{hk}^i \delta_\ell^h - \Gamma_{\ell k}^h \delta_h^i = 0. \quad (\text{C}_5.43)$$

Nous utilisons ce dernier résultat pour en déduire la dérivée covariante de la métrique contravariante :

$$\nabla_k \delta_\ell^i = \nabla_k (g^{ij} g_{j\ell}) = g_{j\ell} \nabla_k g^{ij} + g^{ij} \nabla_k g_{j\ell} = g_{j\ell} \nabla_k g^{ij} = 0, \quad (\text{C}_5.44)$$

et donc

$$(5.3.18) \quad \nabla_k g^{ij} = 0.$$

Nous concluons en disant que la dérivée covariante de la métrique est nulle, ce qui constitue la première partie du théorème 25 p. 188.

## Dérivée du déterminant de la métrique

La théorie des déterminants nous permet de développer le déterminant de la métrique sur les lignes

$$g = \varepsilon^{i_1 \dots i_d} \prod_{j=1}^d g_{j i_j}, \quad (\text{C}_5.45)$$

où  $\varepsilon^{i_1 \dots i_d}$  est le symbole totalement antisymétrique de Tullio LEVI-CIVITA.

Une dérivée partielle du déterminant est

$$\frac{\partial g}{\partial q^\ell} = \sum_{k=1}^d \varepsilon^{i_1 \dots i_d} \frac{\partial g_{k i_k}}{\partial q^\ell} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^d g_{j i_j}, \quad (\text{C}_5.46)$$

où nous remarquons avec (C<sub>5.6</sub>) p. 213 que

$$\varepsilon^{i_1 \dots i_d} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^d g_{j i_j} = \text{cof} g_{k i_k} = g g^{i_k k}, \quad (\text{C}_5.47)$$

et par conséquent

$$\frac{\partial g}{\partial q^\ell} = \sum_{k=1}^d \frac{\partial g^{ki_k}}{\partial q^\ell} g g^{i_k k} = g \sum_{k=1}^d \frac{\partial g^{kj}}{\partial q^\ell} g^{jk} = g \frac{\partial g^{kj}}{\partial q^\ell} g^{jk}, \quad (\text{C}_5.48)$$

d'où finalement, en sachant que la métrique est un tenseur symétrique,

$$\frac{\partial g}{\partial q^\ell} = g g^{ij} \frac{\partial g_{ij}}{\partial q^\ell} \quad \text{ou} \quad \frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial q^\ell} = \frac{\partial \ln |g|}{\partial q^\ell} = \frac{2}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial \sqrt{|g|}}{\partial q^\ell} = g^{ij} \frac{\partial g_{ij}}{\partial q^\ell}. \quad (\text{C}_5.49)$$

Il nous reste à déterminer la dérivée covariante de ce déterminant, qui est un pseudoscalaire de poids  $w = 2$ . En effet, lors d'un changement de coordonnées  $q$  vers  $\tilde{q}$

$$\tilde{g} = \left( \frac{\partial q}{\partial \tilde{q}} \right)^2 g. \quad (\text{C}_5.50)$$

Alors

$$\nabla_\ell g = \frac{\partial g}{\partial q^\ell} - w \Gamma_{k\ell}^k g, \quad (\text{C}_5.51)$$

avec l'expression des symboles de CHRISTOFFEL donnée dans l'équation (C<sub>5.30</sub>) p. 215 :

$$\Gamma_{k\ell}^k = \frac{g^{kj}}{2} \left( \frac{\partial g_{kj}}{\partial q^\ell} + \frac{\partial g_{\ell j}}{\partial q^k} - \frac{\partial g_{k\ell}}{\partial q^j} - g_{ki} \Theta_{j\ell}^i - g_{\ell i} \Theta_{jk}^i \right) + \frac{\Theta_{k\ell}^k}{2}. \quad (\text{C}_5.52)$$

Dans cette dernière expression nous constatons certaines simplifications : à cause de la symétrie entre les indices muets  $j$  et  $\ell$

$$\frac{\partial g_{\ell j}}{\partial q^k} = \frac{\partial g_{k\ell}}{\partial q^j}. \quad (\text{C}_5.53)$$

Nous voyons aussi la simplification

$$g^{kj} g_{ki} = \delta_i^j, \quad (\text{C}_5.54)$$

et enfin, la contraction de la métrique, tenseur symétrique, avec la torsion, tenseur antisymétrique, qui disparaît :

$$g^{kj} \Theta_{jk}^i = \frac{g^{kj}}{2} (\Theta_{jk}^i - \Theta_{kj}^i) = \frac{g^{kj}}{2} \Theta_{jk}^i - \frac{g^{jk}}{2} \Theta_{jk}^i = \frac{g^{kj}}{2} \Theta_{jk}^i - \frac{g^{kj}}{2} \Theta_{jk}^i = 0. \quad (\text{C}_5.55)$$

Cela nous amène à

$$\Gamma_{k\ell}^k = \frac{g^{kj}}{2} \frac{\partial g_{kj}}{\partial q^\ell} - \frac{\Theta_{k\ell}^k}{2} + \frac{\Theta_{k\ell}^k}{2} = \frac{1}{2g} \frac{\partial g}{\partial q^\ell}; \quad (\text{C}_5.56)$$

ainsi

$$\nabla_\ell g = \frac{\partial g}{\partial q^\ell} - 2g \frac{1}{2g} \frac{\partial g}{\partial q^\ell} = 0. \quad (\text{C}_5.57)$$

Nous concluons que la dérivée covariante du déterminant de la métrique est nulle, ce qui constitue la seconde partie du théorème 25 p. 188.

## Le laplacien

Nous pouvons désormais introduire le laplacien, en particulier celui d'un scalaire avec la définition 13 p. 188

$$(5.3.20) \quad \Delta f = \nabla_i(\nabla^i f),$$

puisque  $\nabla^i f$  a maintenant un sens :

$$\nabla^i f = g^{ij} \nabla_j f. \quad (C_5.58)$$

Ainsi

$$\Delta f = \nabla_i(g^{ij} \nabla_j f), \quad (C_5.59)$$

et avec la règle de LEIBNIZ, la dérivée d'un produit se décompose en

$$\Delta f = \nabla_i g^{ij} \nabla_j f + g^{ij} \nabla_i(\nabla_j f), \quad (C_5.60)$$

subséquentement puisque la dérivée covariante de la métrique est nulle

$$\Delta f = g^{ij} \nabla_i(\nabla_j f), \quad (C_5.61)$$

ce qui prouve la commutation des dérivées covariante et contravariante

$$\Delta f = \nabla^j(\nabla_j f). \quad (C_5.62)$$

Maintenant, en utilisant l'expression de la dérivée covariante, nous allons expliciter davantage le laplacien. Tout d'abord en partant de

$$\Delta f = \nabla_i(g^{ij} \nabla_j f), \quad (C_5.63)$$

nous avons en développant la dérivée covariante  $\nabla_i$  du vecteur  $g^{ij} \nabla_j f$

$$\Delta f = \frac{\partial(g^{ij} \nabla_j f)}{\partial q^i} + \Gamma_{ki}^i g^{kj} \nabla_j f, \quad (C_5.64)$$

avec l'expression des symboles de CHRISTOFFEL donnée en (C<sub>5</sub>.30) p. 215 :

$$\Gamma_{ki}^i = \frac{g^{i\ell}}{2} \left( \frac{\partial g_{k\ell}}{\partial q^i} + \frac{\partial g_{i\ell}}{\partial q^k} - \frac{\partial g_{ki}}{\partial q^\ell} - g_{km} \Theta_{\ell i}^m - g_{im} \Theta_{\ell k}^m \right) + \frac{\Theta_{ki}^i}{2}. \quad (C_5.65)$$

D'une manière analogue, lors du calcul de la dérivée covariante du déterminant de la métrique, l'équation (C<sub>5</sub>.56) p. 218 devient avec  $\Gamma_{ki}^i - \Gamma_{ik}^i = \Theta_{ki}^i$

$$\Gamma_{ki}^i = \frac{g^{i\ell}}{2} \frac{\partial g_{i\ell}}{\partial q^k} + \Theta_{ki}^i. \quad (C_5.66)$$

Par conséquent

$$\Delta f = \frac{\partial g^{ij}}{\partial q^i} \nabla_j f + g^{ij} \frac{\partial(\nabla_j f)}{\partial q^i} + \frac{g^{i\ell}}{2} \frac{\partial g_{i\ell}}{\partial q^k} g^{kj} \nabla_j f + \Theta_{ki}^i g^{kj} \nabla_j f, \quad (C_5.67)$$

ce qui donne après factorisation par  $\nabla_j f = \frac{\partial f}{\partial q^j}$

$$\Delta f = \left( \frac{g^{ij} g^{kl} \partial g_{kl}}{2 \partial q^i} + \frac{\partial g^{ij}}{\partial q^i} + g^{jk} \Theta_{ki}^i \right) \frac{\partial f}{\partial q^j} + g^{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial q^i \partial q^j}. \quad (\text{C}_5.68)$$

À partir de là, nous pouvons utiliser la dérivée du déterminant de la métrique dans l'équation (C<sub>5.49</sub>) p. 218

$$\frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial q^i} = g^{kl} \frac{\partial g_{kl}}{\partial q^i} = \frac{2}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial \sqrt{|g|}}{\partial q^i}, \quad (\text{C}_5.69)$$

ce qui permet d'écrire

$$\Delta f = \left( \frac{g^{ij}}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial \sqrt{|g|}}{\partial q^i} + \frac{\partial g^{ij}}{\partial q^i} \right) \frac{\partial f}{\partial q^j} + g^{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial q^i \partial q^j} + g^{jk} \Theta_{ki}^i \frac{\partial f}{\partial q^j}, \quad (\text{C}_5.70)$$

qui devient

$$\Delta f = \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left( \sqrt{|g|} g^{ij} \frac{\partial f}{\partial q^j} \right) + g^{jk} \Theta_{ki}^i \frac{\partial f}{\partial q^j}. \quad (\text{C}_5.71)$$

Maintenant, nous utilisons

$$\Delta f = g^{ij} \nabla_i (\nabla_j f) = g^{ij} \frac{\partial (\nabla_j f)}{\partial q^i} - g^{ij} \Gamma_{ji}^k \nabla_k f = g^{ij} \frac{\partial (\nabla_j f)}{\partial q^i} - g^{ik} \Gamma_{ki}^j \nabla_j f. \quad (\text{C}_5.72)$$

Or, avec l'expression des symboles de CHRISTOFFEL dans l'équation (C<sub>5.30</sub>) p. 215

$$\Gamma_{ki}^j = \frac{g^{j\ell}}{2} \left( \frac{\partial g_{k\ell}}{\partial q^i} + \frac{\partial g_{i\ell}}{\partial q^k} - \frac{\partial g_{ki}}{\partial q^\ell} - g_{km} \Theta_{li}^m - g_{im} \Theta_{lk}^m \right) + \frac{\Theta_{ki}^j}{2}, \quad (\text{C}_5.73)$$

puis nous trouvons que

$$g^{ik} \Gamma_{ki}^j = \frac{g^{ji} g^{k\ell} + g^{jk} g^{i\ell} - g^{j\ell} g^{ik} \partial g_{ik}}{2 \partial q^\ell} - g^{j\ell} \Theta_{li}^i, \quad (\text{C}_5.74)$$

puis finalement

$$\Delta f = \left( \frac{g^{ij} g^{k\ell} - 2g^{j\ell} g^{ik} \partial g_{k\ell}}{2 \partial q^i} + g^{jk} \Theta_{ki}^i \right) \frac{\partial f}{\partial q^j} + g^{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial q^i \partial q^j}. \quad (\text{C}_5.75)$$

À partir de maintenant, nous supposons la connexion sans torsion, ce qui nous donne le théorème 23 p. 185 :

$$(5.3.3) \quad \Gamma_{kj}^i = \Gamma_{jk}^i = \frac{g^{i\ell}}{2} \left( \frac{\partial g_{j\ell}}{\partial q^k} + \frac{\partial g_{k\ell}}{\partial q^j} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial q^\ell} \right)$$

et le théorème 26 p. 188 où les trois expressions du laplacien sont respectivement à partir de (C<sub>5.68</sub>)

$$(5.3.21) \quad \Delta f = \left( \frac{g^{ij} g^{k\ell} \partial g_{k\ell}}{2 \partial q^i} + \frac{\partial g^{ij}}{\partial q^i} \right) \frac{\partial f}{\partial q^j} + g^{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial q^i \partial q^j},$$

à partir de (C<sub>5.71</sub>) p. 220

$$(5.3.22) \quad \Delta f = \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left( \sqrt{|g|} g^{ij} \frac{\partial f}{\partial q^j} \right)$$

et à partir de (C<sub>5.75</sub>) p. 220

$$(5.3.23) \quad \Delta f = \frac{g^{ij} g^{kl} - 2g^{jl} g^{ik}}{2} \frac{\partial g_{kl}}{\partial q^i} \frac{\partial f}{\partial q^j} + g^{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial q^i \partial q^j}.$$

## Bibliographie du chapitre 5

- [34] C. VILAIN, « La Mécanique de Christian HUYGENS », Éditions Albert Blanchard, Paris, 1996.
- [35] L. LANDAU & E. LIFCHITZ, « Physique théorique, Mécanique », Mir, Moscou, 1982.
- [36] H. GOLDSTEIN, « Mécanique classique », PUF, Paris, 1964.
- [37] P. POPESCU-PAMPU, « Variétés », Images des Mathématiques, CNRS, 2009.
- [38] É. CARTAN, « Leçons sur la géométrie des espaces de Riemann », Gauthier-Villars, Paris, 1928.
- [39] L. BRILLOUIN, « Les tenseurs en mécanique et en élasticité », Masson, Paris, 1949.
- [40] M. DENIS-PAPIN & A. KAUFMANN « Cours de calcul tensoriel appliqué », Albin Michel, Paris, 1953.
- [41] A. DELACHET « Le calcul tensoriel », PUF, Paris, 1974.
- [42] W. APPEL « Mathématiques pour la physique et les physiciens », 3e éd., H & K Éditions, Paris, 2005.
- [43] A. DONEDDU « Nouveau cours de mathématiques, Espaces euclidiens et hermitiens. Géométries », Vuibert, Paris, 1977.
- [44] M. BLAY, « L'homme sans repos », Armand Colin, Paris, 2002.

« Could beauty, my lord, have better commerce than with honesty ? » †  
William SHAKESPEARE

## Chapitre 6

# L'équation de SCHRÖDINGER collective

**C**ET CHAPITRE reprend profondément les écrits d'Erwin SCHRÖDINGER sur la genèse de l'équation qui porte aujourd'hui son nom. Nous commentons son texte et nous réécrivons les équations de façon à rendre le texte plus accessible à un physicien du 21<sup>e</sup> siècle. Mais nous avons tenté de conserver autant que possible la démarche de l'illustre personne. Toute l'argumentation du chapitre précédent a été développée dans l'espace appelé *extension en configuration*<sup>1</sup>, nous continuons à travailler dans cet espace. Les deux premières sections relèvent de l'histoire des sciences mais elles montrent que le formalisme de l'équation de SCHRÖDINGER était, dès son origine, placé dans le cadre mathématique des espaces de RIEMANN. La troisième et la quatrième section explicitent les règles de quantification et de calculs des observables. Enfin les deux dernières sections sont consacrées à l'équation de SCHRÖDINGER collective dont nous parlons depuis le début, et que nous pouvons maintenant établir et résoudre pour achever l'étude du noyau, de ses symétries géométriques et des transitions de forme.

### 6.1 Les ondes dans l'extension en configuration

WILLIAM HAMILTON connaissait le lien très fort entre la théorie de la mécanique analytique qu'il développa et le phénomène de propagation des ondes. Erwin SCHRÖDINGER le dit explicitement :

« [...] Le principe de variation de HAMILTON peut être considéré comme un principe de FERMAT pour une propagation des ondes dans [l'extension en] configuration et son équation aux dérivées partielles n'exprime autre chose que le principe de HUYGENS pour cette même propagation. Malheureusement, dans la plupart des exposés modernes ces conceptions si puissantes et si fécondes se trouvent dépouillées du magnifique vêtement intuitif que leur avait donné [William] HAMILTON, et qu'on laisse aujourd'hui de côté comme un accessoire superflu, au profit d'une exposition plus terne de l'enchaînement analytique de la théorie. » [45] et [46] (bibliographie p. 261)

---

†. « La beauté pourrait-elle, mon seigneur, avoir meilleur commerce avec l'honnêteté ? »

1. L'extension en configuration est l'espace des coordonnées généralisées, en anglais *configuration space*.

À l'instar d'Erwin SCHRÖDINGER, nous considérons l'équation de HAMILTON-JACOBI comme point de départ afin d'établir l'esquisse du passage à la mécanique ondulatoire, p. 201 :

$$(5.7.4) \quad \frac{\partial S}{\partial t}(q, t) + H(q, \nabla S, t) = 0,$$

où  $S$  est l'action du système.

Nous nous intéressons aux systèmes conservatifs et nous pouvons écrire que le hamiltonien ne dépend plus explicitement du temps. La dépendance de l'action vis-à-vis du temps est alors extrêmement simplifiée :

$$S(q, t) = W(q) - Et, \quad (6.1.1)$$

où  $E$  est une constante d'intégration qui représente l'énergie du système. Cela permet de réduire l'équation de HAMILTON-JACOBI à une forme plus simple :

$$H(q, \nabla S, t) = E, \quad (6.1.2)$$

puisqu'en dérivant l'équation (6.1.1) nous avons

$$\frac{\partial S}{\partial t}(q, t) = -E. \quad (6.1.3)$$

Le hamiltonien est exprimé à partir des énergies du système<sup>2</sup>

$$H(q, \nabla S, t) = T(q, \nabla S) + V(q), \quad (6.1.5)$$

où  $T$  est l'énergie cinétique et  $V$  est l'énergie potentielle. Nous pouvons maintenant donner une signification géométrique en considérant l'extension en configuration comme un espace métrique non euclidien dont la métrique est définie à partir de l'énergie cinétique. Ainsi la distance infinitésimale est posée :

$$ds^2 = 2T(q, \dot{q})dt^2 \quad \text{et} \quad T(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}M_{ij}(q)\dot{q}^i\dot{q}^j, \quad (6.1.6)$$

où  $M_{ij}$  représente la métrique de l'extension en configuration. Avec la métrique, et comme nous l'avons présenté au chapitre 5 dans la section 5.4 p. 191, nous pouvons passer des vitesses aux impulsions avec

$$p_i = M_{ij}\dot{q}^j \quad \text{et} \quad \dot{q}^i = M^{ik}p_k, \quad (6.1.7)$$

et l'énergie cinétique devient

$$T = \frac{1}{2}M^{ik}p_ip_k. \quad (6.1.8)$$

---

2. Pour conserver une plus grande généralité, il faudrait écrire le hamiltonien avec les énergies cinétique et potentielle effectives précisées respectivement dans la définition 15 p. 193 et dans le théorème 30, équation (5.6.17) p. 200 :

$$H(q, \nabla S, t) = T_{\text{eff}}(q, \nabla S) + V_{\text{eff}}(q, \nabla S), \quad (6.1.4)$$

mais afin de conserver la proximité avec le texte d'origine de SCHRÖDINGER, nous continuons à utiliser  $T$  à la place de  $T_{\text{eff}}$  et  $V$  à la place de  $V_{\text{eff}}$ .



Comme l'impulsion s'identifie à la dérivée covariante de l'action, p. 201,

$$(5.7.2) \quad \nabla_i S = p_i,$$

nous avons

$$T = \frac{1}{2} \nabla_i S \nabla_k S, \quad (6.1.9)$$

qui n'est autre que le carré de la norme de la dérivée covariante de l'action

$$T = \frac{1}{2} \left\| \vec{\nabla} S \right\|^2. \quad (6.1.10)$$

Nous réécrivons l'équation de HAMILTON-JACOBI sous la forme

$$\frac{1}{2} \left\| \vec{\nabla} S \right\|^2 = E - V \quad (6.1.11)$$

et nous lui donnons pour finir une forme similaire à l'équation eikonale de l'optique géométrique

$$\left\| \vec{\nabla} S \right\| = \sqrt{2(E - V)}. \quad (6.1.12)$$

Dans sa thèse soutenue en 1924, Louis DE BROGLIE réalisa l'identification du principe de moindre action de la mécanique avec le principe de FERMAT de l'optique. Et il utilisa le rapprochement effectué par HAMILTON entre l'optique géométrique et l'optique ondulatoire pour forger la dualité onde-corpuscule (voir par exemple [48] bibliographie p. 261). C'est dans ce mouvement qu'Erwin SCHRÖDINGER proposa alors d'interpréter cette forme eikonale donnée à l'équation de HAMILTON-JACOBI pour affermir davantage la dualité onde-corpuscule et aboutir à l'équation d'onde de la mécanique en train de devenir ondulatoire.

« Admettons qu'on ait trouvé une [action  $S$ ] qui satisfasse à [la condition de conservativité du système]. On peut en donner une représentation intuitive pour un instant déterminé  $t$ , en traçant dans [l'extension en configuration] l'ensemble des surfaces [d'isoaction], et en attachant à chacune d'elles la valeur de [ $S$ ] qui lui correspond.

Dans ces conditions l'équation [précédente] nous fournit [...] une règle précise pour construire successivement toutes les surfaces et trouver les [valeurs de  $S$ ] qui leur correspondent, en partant de l'une quelconque d'entre elles et en supposant données, uniquement cette surface initiale et la valeur de [ $S$ ] correspondante. De plus [ces seules] données indispensables [...] peuvent être choisies d'une façon absolument arbitraire. [...] Le procédé de construction épuise donc le contenu de l'équation différentielle : en effet, on peut aboutir à n'importe quelle solution de cette équation pourvu qu'on choisisse convenablement la surface initiale et la valeur de [ $S$ ] de départ. [...] Soit donc une surface arbitraire donnée et soit  $W_0$  la valeur qui lui correspond. Pour obtenir la surface correspondant à la valeur  $W_0 + dW$ , choisissons arbitrairement un côté positif de la surface donnée, menons la normale en chacun de ses points et portons le long de cette normale (en tenant compte du signe de  $dW$ ) la longueur<sup>3</sup>

3.

$$\left\| \vec{\nabla} S \right\| = \left\| \vec{\nabla} W \right\| \approx \frac{dW}{d\ell} \quad (6.1.13)$$

alors

$$\frac{dW}{d\ell} \approx \sqrt{2(E - V)}. \quad (6.1.14)$$

$$d\ell = \frac{dW}{\sqrt{2(E - V)}}. \quad (6.1.15)$$

Les points ainsi obtenus décrivent la surface  $W_0 + dW$ . En procédant de la sorte, on peut construire l'une après l'autre tout l'ensemble des surfaces [d'isoaction] cherchées, des deux côtés de la surface initiale.

Cette construction peut se faire de deux manières différentes parce qu'on aurait pu choisir au début l'autre côté de la surface comme côté positif. Cependant une fois la construction commencée cette ambiguïté disparaît, c'est-à-dire qu'on n'a plus le droit [...] de choisir arbitrairement le signe des côtés de la surface à laquelle on vient d'aboutir ; en effet, cela impliquerait une discontinuité de la dérivée première de [l'action  $S$ ]. D'ailleurs les deux suites de surfaces qu'on rencontre dans ces deux cas sont évidemment identiques : seules les valeurs de [l'action  $S$ ] qui leurs sont attachées varient en sens [opposé].

Considérons maintenant la variation extrêmement simple de [l'action]  $S$  avec le temps. L'équation [de conservation de l'énergie] nous apprend que la répartition des [isoactions  $S$ ] est représentée par la même suite de surfaces quel que soit l'instant postérieur (ou antérieur) [...] considéré ; la seule différence consiste en ce qu'il faut attribuer aux surfaces individuelles d'autres valeurs [de  $S$ ] : pour préciser, la surface ayant eu [à la date  $t$ ] la valeur [ $S$ ]  $a$ , [à la date]  $t + t'$ , la valeur [ $S - Et'$ ]. Les valeurs de [ $S$ ] se déplacent pour ainsi dire d'une surface à l'autre, suivant une loi simple et bien définie, dans le sens des [ $S$ ] croissantes si  $E$  est positive. Mais au lieu de cela nous pouvons imaginer que ce sont les surfaces elles-mêmes qui se déplacent, en se déformant pour prendre l'aspect et la place de celles qui suivent, et en transportant avec elles leur valeur de [ $S$ ]. La loi du mouvement des surfaces peut s'obtenir en écrivant par exemple que la surface  $W_0$  doit occuper [à la date]  $t + dt$  la place où se trouvait la surface [ $W_0 + Et$  à la date]  $t$ . Cette condition est satisfaite d'après [l'équation précédente], si chacun des points de la surface  $W_0$  se déplace sur la normale positive à celle-ci d'une quantité

$$d\ell = \frac{Edt}{\sqrt{2(E - V)}}. \quad (6.1.16)$$

**PROPOSITION 15 : CÉLÉRITÉ DES ONDES**

En d'autres termes le mouvement des surfaces se poursuit à une vitesse normale

$$u = \frac{d\ell}{dt} = \frac{E}{\sqrt{2(E - V)}}, \quad (6.1.17)$$

qui n'est fonction que des coordonnées [puisque  $E$  est une constante du mouvement].



On voit maintenant que notre ensemble de surfaces [d'isoaction] peut être considéré comme un ensemble de surfaces d'ondes progressives dans [l'extension en configuration], qui restent les mêmes au cours du temps et dont la valeur de la vitesse de phase en chaque point est donnée par [l'équation précédente]. [...] [Les] < rayons >, c'est-à-dire les [courbes] orthogonales [aux] surfaces d'ondes, coïncident avec les trajectoires

du système pour l'énergie  $E$  ; ce résultat concorde avec celui qu'on déduit du système bien connu d'équations

$$p_k = \frac{\partial S}{\partial q^k}, \quad (6.1.18)$$

et suivant lequel à partir de toute [action] donnée, on peut déduire une suite de trajectoires du système [...]. [...] Mais [...] on peut dire que l'ensemble des surfaces d'ondes n'est relié que d'une façon très lâche au mouvement mécanique lui-même, parce que le point représentatif du système mécanique ne se meut pas le long du rayon avec la vitesse de propagation  $u$  des ondes, mais au contraire, avec une vitesse proportionnelle à  $\frac{1}{u}$  (si  $E$  demeure constante).

Cette vitesse peut s'obtenir directement à partir de [l'énergie cinétique] :

$$v = \frac{ds}{dt} = \sqrt{2T} = \sqrt{2(E - V)} = \frac{E}{u}. \quad (6.1.19)$$

Le désaccord entre le mouvement du point représentatif et la propagation des ondes est évident. On le lit d'abord sur  $p_k = \frac{\partial S}{\partial q^k}$  : la vitesse du point est grande là où les surfaces [d'isoaction  $S$ ] sont très rapprochées les unes des autres, donc où  $u$  est très petite. Ensuite, on peut le déduire de la signification de  $[S]$ , qui est l'intégrale [du lagrangien] par rapport au temps :  $[S]$  varie évidemment pendant le mouvement sur une durée  $dt$  de  $L dt = (T - V) dt$ , donc le point représentatif ne peut pas rester en contact d'une façon permanente avec la même surface [d'isoaction  $S$ ]. Tout cela explique pourquoi notre analogie ne fait intervenir aucune des notions importantes de la théorie des ondes, comme par exemple les amplitudes, la longueur d'onde, la fréquence, ou d'une façon tout à fait générale, la forme de l'onde : toutes ces grandeurs n'ont pas d'analogue mécanique. Quant à la fonction d'onde elle-même, on n'en parle même pas ; [l'action  $S$ ] représente la phase des ondes [puisque qu'un front est une surface d'isophasse] — signification qui reste d'ailleurs un peu vague à cause de l'incertitude où l'on se trouve quant à la forme de celles-ci. » [45] et [46] (bibliographie p. 261)

Erwin SCHRÖDINGER considéra que l'analogie que nous venons de rappeler entre la théorie des ondes et celle de la mécanique classique constituait un cadre adéquat au développement d'une mécanique ondulatoire.

## 6.2 La mécanique ondulatoire

COMME NOUS venons de le voir, l'action  $S$  nous donne la phase des ondes dans l'extension en configuration ou, plus exactement, la phase  $\varsigma$  (lettre grecque sigma finale) est proportionnelle à l'action

$$\varsigma \propto S. \quad (6.2.1)$$

Avec l'analyse dimensionnelle nous constatons que

$$\dim \varsigma = 1 \quad \text{et} \quad \dim S = \dim h = \text{ML}^2\text{T}^{-1}. \quad (6.2.2)$$

**PROPOSITION 16 : PHASE DES ONDES**

Afin de respecter la congruence géométrique usuelle des phases, nous proposons d'exprimer la phase

$$\varsigma = 2\pi \frac{S}{h} = \frac{S}{\hbar}. \quad (6.2.3)$$

Nous donnons maintenant chair à ces ondes dans l'extension en configuration en exprimant leur amplitude  $\psi$  aux fronts d'onde qui sont les surfaces d'isoaction. Cela constitue les prémisses de la mécanique ondulatoire qu'Erwin SCHRÖDINGER bâtit ensuite (voir [45], [47] et [49] bibliographie p. 261), comme nous allons l'exposer. Pour cela, nous considérons une amplitude avec une forme sinusoïdale sachant que l'analyse de Joseph FOURIER permet ensuite de considérer toute autre forme. Ainsi nous écrivons

$$\psi \propto e^{i\varsigma} = e^{i\frac{S}{\hbar}} = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{-i\frac{W(q)}{\hbar}}. \quad (6.2.4)$$

**PROPOSITION 17 : FRÉQUENCE DES ONDES**

Nous déduisons alors naturellement la fréquence de ces ondes et leur pulsation :

$$\nu = \frac{E}{h} \quad \text{et} \quad \omega = \frac{E}{\hbar}. \quad (6.2.5)$$

La fréquence des ondes dans l'extension en configuration est donc proportionnelle à l'énergie du système. Comme pour toute onde, la longueur d'onde  $\lambda$  est la distance parcourue par un front d'onde à la célérité  $u$  pendant la durée d'une période  $\frac{1}{\nu}$  donc

$$\lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{E}{\nu \sqrt{2(E-V)}} = \frac{h}{\sqrt{2(h\nu - V)}}. \quad (6.2.6)$$

Cependant aucune équation d'onde n'a été écrite pour le moment, ou n'a été déduite de la théorie de la mécanique classique.

**PROPOSITION 18 : ÉQUATION DE PROPAGATION DES ONDES**

Erwin SCHRÖDINGER postula la forme bien connue de l'équation de Jean Le Rond D'ALEMBERT en prenant la vitesse  $u$  précédemment proposée pour la célérité

$$\Delta\psi - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0. \quad (6.2.7)$$

Alors, étant donnée la forme précédente de  $\psi$ , nous avons

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\frac{E^2}{\hbar^2}\psi, \quad (6.2.8)$$

et avec l'expression de la célérité

$$u = \frac{E}{\sqrt{2(E-V)}}, \quad (6.2.9)$$

nous obtenons

$$\Delta\psi + \frac{2(E - V)}{\hbar^2}\psi = 0 \quad (6.2.10)$$

ou, dans une forme presque plus habituelle,

$$-\frac{\hbar^2}{2}\Delta\psi + V\psi = E\psi. \quad (6.2.11)$$

Cependant cette équation ne satisfait pas entièrement ERWIN SCHRÖDINGER car elle ne permet pas de répondre aux situations où l'énergie potentielle dépend explicitement du temps, sans parler d'une éventuelle dépendance vis-à-vis des vitesses. Il souhaita l'étendre aux systèmes non conservatifs. La forme sinusoïdale ne peut plus convenir et il proposa à la place de considérer plus primitivement et de manière *ad hoc* la relation

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\frac{E^2}{\hbar^2}\psi, \quad (6.2.12)$$

avec laquelle nous éliminons<sup>4</sup> l'intervention explicite de l'énergie  $E$  dans l'équation de D'ALEM-

---

4. À partir de l'équation de D'ALEMBERT, p. 228,

$$(6.2.7) \quad \Delta\psi - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0$$

et de l'expression de la célérité donnée dans la proposition 15 p. 226

$$(6.1.17) \quad u = \frac{d\ell}{dt} = \frac{E}{\sqrt{2(E - V)}},$$

nous obtenons

$$\Delta\psi - \frac{2(E - V)}{E^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0 \quad \text{ou bien} \quad \Delta\psi + \frac{2V}{E^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \frac{2}{E} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0. \quad (6.2.13)$$

Alors la relation *ad hoc* (6.2.12) nous permet de réécrire le deuxième terme du membre de gauche de cette dernière équation :

$$\frac{2V}{E^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\frac{2V}{\hbar^2}\psi, \quad (6.2.14)$$

et l'équation d'onde s'écrit maintenant :

$$\Delta\psi - \frac{2V}{\hbar^2}V\psi = \frac{2}{E} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}, \quad \text{ou bien} \quad -\frac{\hbar^2}{2}\Delta\psi + V\psi = -\frac{\hbar^2}{E} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}, \quad (6.2.15)$$

soit encore en introduisant le concept d'opérateur

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V\right)\psi = -\frac{\hbar^2}{E} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}. \quad (6.2.16)$$

Cette équation est élevée au carré

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V\right)^2\psi^2 = \frac{\hbar^4}{E^2} \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{E^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} \times \hbar^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} \quad (6.2.17)$$

et nous utilisons encore la relation *ad hoc*

../..

BERT et nous obtenons

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V\right)^2 \psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}. \quad (6.2.19)$$

Dans le cas où  $V$  ne dépend pas explicitement du temps, cette équation d'onde admet des solutions conjuguées correspondant à des énergies opposées. Mais le cas plus général où  $V$  dépend explicitement du temps se heurte à la difficulté de l'intervention de termes contenant  $\frac{\partial V}{\partial t}$ , et Erwin SCHRÖDINGER renonça à cette équation du quatrième ordre avec l'espoir de pouvoir y revenir. Il remarqua que la relation *ad hoc* du second ordre

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\frac{E^2}{\hbar^2} \psi \quad (6.2.20)$$

aurait tout aussi bien pu être du premier ordre.

**PROPOSITION 19 : RELATIONS AD HOC**

Erwin SCHRÖDINGER proposa que l'onde respecte les relations

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \pm \frac{iE}{\hbar} \psi \quad (6.2.21)$$

et

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \pm \frac{iE}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (6.2.22)$$

où  $E$  est *a priori* dépendante du temps. ~~~~~

Avec ces nouvelles relations, il substitua l'énergie dans l'équation de D'ALEMBERT :

$$\Delta \psi - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0 \quad (6.2.23)$$

avec la seconde relation *ad hoc* (6.2.22)

$$\Delta \psi - \frac{2(E - V)}{E^2} \left( \pm \frac{iE}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = 0 \quad \text{ou encore} \quad \Delta \psi \pm \frac{2iV}{\hbar E} \frac{\partial \psi}{\partial t} \mp \frac{2i}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 \quad (6.2.24)$$

et avec la première relation *ad hoc* (6.2.21)

$$\Delta \psi \pm \frac{2iV}{\hbar E} \left( \pm \frac{iE}{\hbar} \psi \right) = \pm \frac{2i}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (6.2.25)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V\right)^2 \psi^2 = -\psi \times \hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}; \quad (6.2.18)$$

d'où finalement

$$(6.2.19) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V\right)^2 \psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}.$$

ce qui nous conduit à

$$-\frac{\hbar^2}{2}\Delta\psi + V\psi = \mp i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \quad (6.2.26)$$

Nous avons là deux équations qui se rassemblent en une seule dans la mesure où on considère que  $\psi$  est une grandeur « essentiellement complexe »<sup>5</sup> et que si  $\psi$  est solution de l'une des deux équations,  $\psi^*$  est solution de l'autre équation. Par conséquent  $\psi$  et  $\psi^*$  sont deux solutions linéairement indépendantes d'une unique équation.

**PROPOSITION 20 : ÉQUATION DES ONDES**

L'équation des ondes dans l'extension en configuration est<sup>6</sup>

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta\psi + \hat{V}\psi. \quad (6.2.27)$$

**SCOLIE 8 : BILAN DE LA DÉMARCHE HEURISTIQUE**

Voyons le chemin parcouru. Nous sommes partis de l'équation de HAMILTON-JACOBI

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H = 0 \quad \text{avec} \quad H = T_{\text{eff}} + V_{\text{eff}} = \frac{1}{2}M^{ij}p_i p_j + V_{\text{eff}}, \quad (6.2.28)$$

soit

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = T_{\text{eff}} + V_{\text{eff}}. \quad (6.2.29)$$

Nous avons proposé d'associer l'action à la phase des ondes et de reprendre l'équation de propagation des ondes de D'ALEMBERT avec la célérité des ondes suggérée par la mécanique analytique. Puis nous avons utilisé deux relations *ad hoc* pour arriver à l'équation de SCHRÖDINGER :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta\psi + \hat{V}_{\text{eff}}\psi. \quad (6.2.30)$$

5. Je ne résiste pas à la tentation de reproduire une note ajoutée en 1932 par Erwin SCHRÖDINGER, qui montre une fois de plus l'attention de cet homme à dévoiler sa pensée avec ses errements afin d'aider ses camarades. Je pense qu'une telle attitude est extrêmement féconde car comme le dit Évariste GALOIS : « Un auteur ne nuit jamais tant à ses lecteurs que quand il dissimule une difficulté ».

Erwin SCHRÖDINGER :

« Les mots < essentiellement complexe > cherchent à dissimuler ici une grande difficulté. Dans son désir d'envisager à tout prix le phénomène de propagation des ondes  $\psi$  comme quelque chose de réel dans le sens classique de ce terme, l'auteur s'est refusé de reconnaître franchement que tout le développement de la théorie mettait de plus en plus clairement en évidence le caractère essentiellement complexe de la fonction d'onde. Et cependant cette fonction est déterminée par une équation dont les coefficients sont essentiellement complexes ! Mais comment le  $\sqrt{-1}$  a-t-il pu s'introduire dans cette équation ? Une réponse, dont je n'ose indiquer que le sens général, a été donnée à cette question par un physicien, qui a autrefois quitté l'Autriche, mais qui, malgré de longues années passées à l'étranger, n'a pas complètement perdu son humeur mordante de Viennois et qui, en outre, est connu pour sa faculté de trouver le mot juste, d'autant plus qu'il est plus cru. Voici cette réponse : < Le  $\sqrt{-1}$  s'est glissé dans l'équation comme quelque chose que nous laissons échapper par hasard, en éprouvant toutefois un soulagement inappréciable après lui avoir donné naissance involontairement. > ».

6. Plus généralement l'énergie potentielle est l'énergie potentielle effective.

Sur le plan dimensionnel, l'équation de HAMILTON-JACOBI et celle de SCHRÖDINGER sont toutes les deux des équations énergétiques. Mais si l'équation de HAMILTON-JACOBI est une équation entre grandeurs —  $\frac{\partial S}{\partial t}$ ,  $T_{\text{eff}}$  et  $V_{\text{eff}}$  — celle de SCHRÖDINGER est une équation entre opérateurs —  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  et  $-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + \hat{V}_{\text{eff}}$  — agissant sur l'unique grandeur  $\psi$ . Il est alors assez naturel d'effectuer un rapprochement entre les grandeurs de l'équation de HAMILTON-JACOBI et les opérateurs de l'équation de SCHRÖDINGER. Ainsi nous rapprochons immédiatement  $-\frac{\partial S}{\partial t}$  de  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ . Considérons alors un système mécanique libre, son énergie potentielle est nulle et son hamiltonien s'identifie à son énergie cinétique. En même temps l'équation de SCHRÖDINGER s'écrit simplement

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta \psi, \quad (6.2.31)$$

et nous comprenons que le contenu énergétique de l'opérateur  $-\frac{\hbar^2}{2}\Delta$  doit être associé à l'énergie cinétique et, plus généralement, le contenu énergétique de l'opérateur  $-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V_{\text{eff}}$  doit être associé au hamiltonien. Nous posons donc l'opérateur hamiltonien

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + \hat{V}_{\text{eff}}. \quad (6.2.32)$$

L'équation de SCHRÖDINGER est donc écrite plus succinctement

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi. \quad (6.2.33)$$

Dorénavant cette construction heuristique est placée dans l'Histoire des sciences et nous ajoutons cette équation comme un nouveau principe de la physique<sup>7</sup>. Si nous avons consenti à cet *ex cursus* dans l'Histoire des sciences, c'est pour rappeler que le cadre spatial utilisé par Erwin SCHRÖDINGER était déjà celui des espaces de RIEMANN. Si l'équation de SCHRÖDINGER est couramment utilisée dans un espace euclidien, nous allons, quant à nous, l'utiliser dans son cadre spatial originel, les espaces de RIEMANN. Ce cadre spatial est par ailleurs utilisé dans diverses autres branches de la physique comme l'élasticité ou la relativité générale.



La suite des fondements théoriques de la mécanique quantique est désormais bien connue. En particulier, l'insertion avec la notation de DIRAC de la fonction d'onde  $\psi(q, t)$  dans le cadre spatial des fonctions de carré sommable sur la variété de dimension  $d$  munie de la métrique  $M_{ij}$ , c'est-à-dire dans un espace de HILBERT.

### PRINCIPE 5 : ÉQUATION DE SCHRÖDINGER

L'évolution d'un état  $|\psi(t)\rangle$  d'un système est régie par l'équation de SCHRÖDINGER<sup>8</sup>

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(q, t) |\psi(t)\rangle, \quad (6.2.35)$$

7. Pour voir l'axiomatique précise de la mécanique quantique, nous renvoyons le lecteur au livre de C. COHEN-TANNOUJJI, B. DIU & F. LALOË [50] (bibliographie p. 261) au chapitre 3 pp. 211-266.

8. Nous rappelons que l'équation de SCHRÖDINGER exprimée avec la fonction d'onde s'écrit

../..



où l'opérateur hamiltonien  $\hat{H}(q, t)$  est l'observable associée à l'énergie totale du système obtenue en appliquant les règles de quantification du hamiltonien  $H(q, t)$ .

Nous devons maintenant préciser les règles de quantification dans le cadre des espaces de RIEMANN.

### 6.3 Les règles de quantification

IL S'AGIT ici de donner la manœuvre permettant de passer des grandeurs déterminées par leur expression classique aux observables correspondantes. Les expressions des grandeurs doivent être données en fonction des variables conjuguées, telles que la position et l'impulsion. La quantification consiste à remplacer les variables  $q$  et  $p$  par leurs opérateurs respectifs  $\hat{q}$  et  $\hat{p}$  dans l'expression convenablement symétrisée de l'observable.

**PROPOSITION 21 :**

L'opérateur  $\hat{q}$  coïncide avec la multiplication par  $q$ , soit

$$\hat{q} = q\hat{1}. \tag{6.3.1}$$

L'opérateur  $\hat{p}$  entre en coïncidence avec la dérivée covariante, soit

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla. \tag{6.3.2}$$

La métrique  $M_{ij}$  de l'espace de RIEMANN doit encore être précisée afin de connaître effectivement la dérivée covariante. Cela ne peut être fait à l'intérieur de la mécanique quantique elle-même. La forme de la métrique doit être postulée ou déduite d'une théorie englobante. Comme nous l'avons annoncé aux chapitres 1 et 3, nous sommes confrontés à une telle situation pour établir l'équation de SCHRÖDINGER collective. C'est le tenseur de masse  $B_{ij}$  qui sert de métrique, comme nous allons le voir dans la section 6.5 p. 235. Dans l'annexe C<sub>6</sub> p. 257, nous reprenons un exemple bien connu d'utilisation de l'équation de SCHRÖDINGER, dont nous montrons le traitement avec le formalisme des espaces métriques.

Le hamiltonien classique, qu'il va falloir quantifier, s'écrit d'après les développements du chapitre 5 au théorème 30 p. 200

$$(5.6.15) \quad H = T_{\text{eff}} + V_{\text{eff}},$$

avec l'énergie cinétique effective donnée par la définition 15 p. 193

$$(5.6.16) \quad T_{\text{eff}} = \frac{1}{2}M^{ij}p_i p_j,$$

---


$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(q, t) = \hat{H}(q, t)\psi(q, t), \tag{6.2.34}$$

mais que la notation de DIRAC avec les kets regroupe toutes les représentations, dont celle de la fonction d'onde, et que le ket ne dépend plus des variables  $q^i$  mais uniquement du temps, ce qui justifie l'usage des  $d$  droits pour la dérivée du ket.

et l'énergie potentielle effective définie dans le théorème 30 p. 200

$$(5.6.17) \quad V_{\text{eff}} = V + V_{\text{ten}}$$

et l'énergie potentielle tenseur donnée à la définition 17 p. 194

$$(5.4.31) \quad V_{\text{ten}} = \frac{1}{2} M^{ij} \frac{\partial V}{\partial q^i} \frac{\partial V}{\partial q^j}.$$

Dans l'état actuel, en l'absence d'expression de l'énergie potentielle, seule l'énergie cinétique effective peut être quantifiée en utilisant la nullité de la dérivée covariante dans le théorème 25 p. 188, vue au chapitre 5, et la proposition 21 p. 233 sur la quantification :

$$\hat{T}_{\text{eff}} = \frac{1}{2} M^{ij} \hat{p}_i \hat{p}_j = -\frac{i\hbar}{2} M^{ij} \nabla_i (-i\hbar \nabla_j) = -\frac{\hbar^2}{2} M^{ij} \nabla_i (\nabla_j) = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta. \quad (6.3.3)$$

La question de l'ordre des opérateurs dans l'expression de l'énergie cinétique est traitée dans l'annexe A<sub>6</sub> p. 245. L'opérateur hamiltonien prend donc la forme

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + \hat{V}_{\text{eff}}, \quad (6.3.4)$$

avec l'expression du laplacien dans un espace de RIEMANN donnée dans l'équation (5.3.23) du théorème 26 p. 188 en remplaçant  $g$  par  $M$  :

$$\Delta = \frac{M^{ij} M^{k\ell} - 2M^{j\ell} M^{ik}}{2} \frac{\partial M_{k\ell}}{\partial q^i} \frac{\partial}{\partial q^j} + M^{ij} \frac{\partial^2}{\partial q^i \partial q^j}. \quad (6.3.5)$$

La quantification de l'énergie potentielle va être abordée dans la section 6.5 p. 235.

### SCOLIE 9 : LA DOUBLE NATURE INTRINSÈQUE DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER

La nature intrinsèque de l'équation de SCHRÖDINGER dans l'espace de HILBERT est marquée avec la notation de DIRAC. Ainsi l'état  $|\psi(t)\rangle$  peut être exprimé par exemple avec la fonction d'onde  $\psi(q, t)$  dans la représentation  $|q\rangle$  ou avec la transformée de FOURIER de la fonction d'onde  $\bar{\psi}(p, t)$  dans la représentation  $|p\rangle$ . L'équation de SCHRÖDINGER s'écrit intrinsèquement, p. 232,

$$(6.2.35) \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

et l'utilisation d'une dérivée totale par rapport au temps au lieu d'une dérivée partielle est aussi la signature de cette nature intrinsèque. Par ailleurs, à l'intérieur de la représentation  $|q\rangle$ , l'équation de SCHRÖDINGER bénéficie du caractère intrinsèque vis-à-vis du choix des coordonnées  $q^i$ . C'est la raison pour laquelle l'opérateur  $\hat{p}$  s'exprime avec la dérivée covariante dans la représentation  $|q\rangle$ . Il est d'ailleurs possible que le changement de coordonnées de  $q^i$  en  $\tilde{q}^i$  soit associé à un changement de représentation de  $|q\rangle$  en  $|\tilde{q}\rangle$  et qu'ainsi les deux caractères intrinsèques se trouvent réunis en un seul. Il faudrait approfondir cette question. ~~~~~

Cependant nous devons encore parler du calcul des probabilités et de la réalisation d'une observable, car elles utilisent le calcul intégral dans un espace de RIEMANN.

## 6.4 La densité de probabilité et la réalisation d'une observable

L'AXIOMATIQUE DE la physique quantique définit le calcul des probabilités de réalisation d'une mesure par des intégrales sur l'hypervolume de l'espace de RIEMANN. Comme nous l'avons vu avec le théorème 24 p. 187, l'élément différentiel d'hypervolume  $d\mathcal{V}$  est un scalaire qui s'exprime à partir du produit des éléments différentiels linéaires  $dq^i$ ,  $dV = \prod_{i=1}^d dq^i$ , et de la densité de métrique  $\sqrt{M}$

$$d\mathcal{V} = dV \sqrt{M}. \quad (6.4.1)$$

Le calcul intégral utilisé habituellement en mécanique quantique est donc légèrement modifié.

### THÉORÈME 32 :

Pour la réalisation d'une observable  $O$  dans un espace de RIEMANN, dont la densité de métrique est  $\sqrt{M}$ , nous avons

$$\langle \phi | \hat{O} | \psi \rangle = \int d\mathcal{V} \phi^* \hat{O} \psi = \int dV \sqrt{M} \phi^* \hat{O} \psi, \quad (6.4.2)$$

et pour la normalisation de la densité de probabilité

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int d\mathcal{V} |\psi|^2 = \int dV \sqrt{M} |\psi|^2. \quad (6.4.3)$$

En fait, nous pouvons définir deux densités de probabilités

$$\varrho = \frac{d \langle \psi | \psi \rangle}{d\mathcal{V}} = |\psi|^2, \quad (6.4.4)$$

qui est un scalaire, ou bien

$$\rho = \frac{d \langle \psi | \psi \rangle}{dV} = \sqrt{M} |\psi|^2, \quad (6.4.5)$$

qui est le produit du scalaire précédent avec la densité de métrique  $\sqrt{M}$ , un pseudoscalaire orienté de poids  $w = 1$  d'après le théorème 24 p. 187. La densité de probabilité  $\rho$  est donc elle aussi un pseudoscalaire orienté de poids  $w = 1$ . Nous choisissons d'utiliser cette dernière densité, car elle est définie avec le produit des éléments différentiels linéaires,  $dV = \prod_{i=1}^d dq^i$ . Cet élément différentiel est plus intuitif à utiliser que l'élément différentiel d'hypervolume  $d\mathcal{V}$ , qui tient compte de la métrique. Le choix de l'une ou de l'autre des deux densités est un choix de commodité qui n'affecte en rien la définition des probabilités. D'ailleurs les deux densités existent simultanément et on peut facilement passer de l'une à l'autre.

Nous allons maintenant montrer dans quel contexte nous utilisons toute cette complication des espaces de RIEMANN.

## 6.5 Établissement de l'équation de SCHRÖDINGER collective

NOUS SOMMES maintenant parés pour nous plonger dans l'espace collectif dont nous avons vu un cadre mathématique capable de rendre compte des propriétés physiques que nous

avons mises à jour au chapitre 1. Nous avons vu les expressions classiques des énergies du noyau, l'énergie potentielle donnée au théorème 2 p. 30

$$\bar{V}(q; \tau) = \mathcal{E}_0(q) \quad (6.5.1)$$

et l'énergie cinétique donnée au théorème 4 p. 31

$$\bar{T}(q, \dot{q}; \tau) = \frac{1}{2} B_{m\ell} \dot{q}^m \dot{q}^{\ell*}. \quad (6.5.2)$$

Afin de recouvrir l'expression de l'énergie cinétique en fonction de la norme de la vitesse

$$\bar{T} = \frac{1}{2} \left( \frac{ds}{dt} \right)^2, \quad (6.5.3)$$

nous sommes obligés d'introduire la notion de distance dans l'espace collectif.

**PROPOSITION 22 :**

Le tenseur de masse  $B_{m\ell}$  donné à la définition 2 p. 31 ou au théorème 19 p. 123 ou au corollaire 5 p. 125 est la métrique de l'espace collectif de dimension  $d$ . La distance dans l'espace collectif est définie comme

$$(ds)^2 = B_{m\ell}(q; \tau) dq^m dq^{\ell*}. \quad (6.5.4)$$



Nous pouvons vérifier rapidement que le tenseur de masse est hermitique<sup>9</sup> :

$$B_{\ell m}(q; \tau) = B_{m\ell}^*(q; \tau). \quad (6.5.8)$$

Il faut aussi nous assurer que l'énergie cinétique est bien toujours positive. Pour cela, il suffit d'appliquer le critère de SYLVESTER et de vérifier que les mineurs principaux dominants<sup>10</sup> de la matrice du tenseur, dont le déterminant, sont bien tous positifs. L'hermiticité assure que la distance et l'énergie cinétique sont bien des nombres réels, mais le critère de SYLVESTER les impose comme nombres réels positifs. Dit autrement, la diagonalisation de la matrice associée au tenseur de masse conduit à des valeurs propres réelles grâce à l'hermiticité, mais qui sont aussi toutes positives.

---

9.

$$B_{m\ell}(q; \tau) = 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^n \mathcal{D}_\ell^{k*} \sum_j^{\mathbb{N}^*} \frac{\aleph_{0j}(q; \tau)}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_0(q)} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0(q) \rangle \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0(q) \rangle^* \quad (6.5.5)$$

et en jouant sur les indices muets

$$B_{\ell m}(q; \tau) = 2\hbar^2 \mathcal{D}_\ell^n \mathcal{D}_m^{k*} \sum_j^{\mathbb{N}^*} \frac{\aleph_{0j}(q; \tau)}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_0(q)} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0(q) \rangle \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0(q) \rangle^* \quad (6.5.6)$$

$$= 2\hbar^2 \mathcal{D}_m^{n*} \mathcal{D}_\ell^k \sum_j^{\mathbb{N}^*} \frac{\aleph_{0j}(q; \tau)}{\mathcal{E}_j(q) - \mathcal{E}_0(q)} \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^n} | \Psi_0(q) \rangle^* \langle \Psi_j(q) | \frac{\partial}{\partial q^k} | \Psi_0(q) \rangle. \quad (6.5.7)$$

10. Un mineur principal dominant d'ordre  $n$  est le déterminant d'une sous-matrice obtenue en supprimant  $d-n$  lignes et colonnes de mêmes indices. Le déterminant  $B$  est le mineur principal dominant d'ordre  $d$ .

Désormais nous sommes en mesure de définir le lagrangien du noyon, puis son impulsion et son hamiltonien afin de procéder à la quantification, pour finir par boucler la boucle en obtenant l'évolution collective  $q(t)$  et peut-être d'autres propriétés intéressantes. Le lagrangien du noyon est

$$\bar{L}(q, \dot{q}; \tau) = \bar{T}(q, \dot{q}; \tau) - \mathcal{E}_0(q). \quad (6.5.9)$$

Puisque l'énergie potentielle est purement locale (indépendante de  $\dot{q}$ ), l'équation (5.4.23) p. 193 montre que la quantité de mouvement spécifiée avec la définition 14 p. 192 coïncide avec l'impulsion donnée à la définition 8 p. 180 et, avec cette définition 8 et l'équation (6.5.2) p. 236, nous avons

$$p_m = \frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{q}^m} = \frac{\partial \bar{T}}{\partial \dot{q}^m} = B_{m\ell} \dot{q}^\ell, \quad (6.5.10)$$

relation qui s'inverse en

$$\dot{q}^m = B^{m\ell} p_\ell. \quad (6.5.11)$$

Nous pouvons par conséquent définir convenablement le hamiltonien du noyon, ou hamiltonien collectif :

$$\mathcal{H}(q, p; \tau) = -\bar{L}(q, \dot{q}; \tau) + p_m \dot{q}^m \quad (6.5.12)$$

$$= -\frac{1}{2} B_{m\ell}(q; \tau) \dot{q}^m \dot{q}^\ell + \mathcal{E}_0(q) + p_m \dot{q}^m \quad (6.5.13)$$

$$= -\frac{1}{2} p_m \dot{q}^m + \mathcal{E}_0(q) + p_m \dot{q}^m \quad (6.5.14)$$

$$= \frac{1}{2} p_m \dot{q}^m + \mathcal{E}_0(q) \quad (6.5.15)$$

$$= \frac{1}{2} B^{m\ell} p_m p_\ell + \mathcal{E}_0(q). \quad (6.5.16)$$

Alors en utilisant les règles de quantification précisées dans la section 6.3, nous remplaçons dans l'expression du hamiltonien défini classiquement, qui ne nécessite pas ici d'être convenablement symétrisé<sup>11</sup>, les grandeurs  $q^m$  et  $p_m$  par les observables respectives  $\hat{q}^m$  et  $\hat{p}_m$ . Avec la représentation spatiale, l'expression de ces opérateurs est

$$\hat{q}^m = q^m \hat{\mathbf{1}} \quad (6.5.17)$$

et

$$\hat{p}_m = -i\hbar \nabla_m. \quad (6.5.18)$$

L'état quantique du noyon  $|\Upsilon(t)\rangle$  est associé à sa fonction d'onde  $\Upsilon(q, t)$ . Nous obtenons l'opérateur hamiltonien qui entre dans l'équation de SCHRÖDINGER du noyon :

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2} B^{m\ell} \nabla_m \nabla_\ell + \mathcal{E}_0(q) \hat{\mathbf{1}} = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + \mathcal{E}_0(q) \hat{\mathbf{1}}, \quad (6.5.19)$$

et dans un espace métrique nous pouvons utiliser l'expression du laplacien donnée dans l'équation (5.3.23) du théorème 26 p. 188 en remplaçant  $g$  par  $B$ , ou l'équation (6.3.5) p. 234 en remplaçant  $M$  par  $B$

$$\Delta = \frac{B^{m\ell} B^{jk} - 2B^{\ell k} B^{mj}}{2} \frac{\partial B_{jk}}{\partial q^m} \frac{\partial}{\partial q^\ell} + B^{m\ell} \frac{\partial^2}{\partial q^m \partial q^\ell}. \quad (6.5.20)$$

11. La question de la symétrisation est traitée dans l'annexe A<sub>6</sub> p. 245.

L'équation de SCHRÖDINGER collective est

$$\hat{\mathcal{H}} |\Upsilon(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Upsilon(t)\rangle, \quad (6.5.21)$$

ou bien

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{B^{m\ell} B^{jk} - 2B^{\ell k} B^{mj}}{2} \frac{\partial B_{jk}}{\partial q^m} \frac{\partial \Upsilon}{\partial q^\ell}(q, t) - \frac{\hbar^2}{2} B^{m\ell} \frac{\partial^2 \Upsilon}{\partial q^m \partial q^\ell}(q, t) + \mathcal{E}_0(q) \Upsilon(q, t) = i\hbar \frac{\partial \Upsilon}{\partial t}(q, t), \quad (6.5.22)$$

qui nous permet de connaître enfin l'évolution adiabatique de  $q(t)$  en tant que valeur moyenne de l'observable position  $\hat{q}$ . Il ne s'agit pas d'une valeur moyenne au sens temporel, mais au sens des probabilités.

### THÉORÈME 33 : LOI D'ÉVOLUTION MOYENNE DES COORDONNÉES COLLECTIVES

$$\langle q \rangle(t; \tau) = \langle \Upsilon(t) | \hat{q} | \Upsilon(t) \rangle = \int dq^1 \cdots dq^d \sqrt{B(q; \tau)} \Upsilon^*(q, t) q \Upsilon(q, t). \quad (6.5.23)$$

La valeur moyenne  $\langle q \rangle$  dépend du temps et de la granularité du temps collectif. Avant la quantification,  $q$  dépend explicitement du temps. À la grandeur classique  $q(t)$  correspond l'opérateur hermitique  $\hat{q}$  indépendant du temps. La dépendance temporelle de  $q$  est reportée dans l'état quantique  $|\Upsilon(t)\rangle$  puis dans  $\langle q \rangle(t; \tau)$ .

L'énergie potentielle du noyon ne dépend pas explicitement du temps. Subséquemment le noyon est un système conservatif, ce qui nous simplifie beaucoup la résolution de son équation de SCHRÖDINGER.

### PROPOSITION 23 : ÉVOLUTION ADIABATIQUE ET STATIONNAIRE

Nous proposons de considérer les évolutions adiabatiques et stationnaires. Dans ce cas nous savons que la solution de l'équation de SCHRÖDINGER précédente est obtenue comme combinaison linéaire

$$|\Upsilon(t)\rangle = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}(t) |\Upsilon_{\mathbf{k}}\rangle \quad (6.5.24)$$

des solutions de l'équation de SCHRÖDINGER collective stationnaire

$$\hat{\mathcal{H}} |\Upsilon_{\mathbf{k}}\rangle = \mathcal{E}_{\mathbf{k}} |\Upsilon_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (6.5.25)$$

Les coefficients de la combinaison linéaire étant donnés par :

$$C_{\mathbf{k}}(t) = C_{\mathbf{k}}^0 e^{-i \frac{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{\hbar} t}. \quad (6.5.26)$$

C'est cette équation qu'il convient maintenant de résoudre par voie numérique. C'est l'objet de la section suivante.

## 6.6 Résolution de l'équation de SCHRÖDINGER collective

C'EST LE programme SE\_COL, écrit par nos soins, qui est chargé d'effectuer cette résolution numérique. Toute équation de SCHRÖDINGER est une équation aux dérivées partielles dont l'étude et la résolution fondent toute une partie extrêmement vaste des mathématiques. C'est un problème ardu, tant formellement que numériquement. Pour faciliter la résolution numérique, nous remplaçons la résolution de cette équation aux dérivées partielles par la diagonalisation d'une matrice. Pour cela nous utilisons les propriétés de l'algèbre linéaire que nous offre l'espace de HILBERT dans lequel se trouve toute solution de l'équation de SCHRÖDINGER. Nous considérons une base de HILBERT, infinie, de cet espace de dimension infinie, constituée par les fonctions d'onde  $|\Phi_{n_1 \dots n_d}\rangle$  solutions de l'oscillateur harmonique anisotrope à  $d$  dimensions,  $d$  étant la dimension de l'extension en configuration, l'espace des variables collectives  $q^i$  ou  $\alpha_\lambda^\mu$ . Cette base, dont nous allons expliciter les fonctions un peu plus loin, est orthonormée dans un espace euclidien mais ne l'est plus dans l'espace métrique dans lequel nous sommes plongés :

$$\langle \Phi_{n'_1 \dots n'_d} | \Phi_{n_1 \dots n_d} \rangle = \mathcal{O}_{(n_1 \dots n_d)}^{(n'_1 \dots n'_d)}. \quad (6.6.1)$$

Une solution  $|\Upsilon_{\mathbf{k}}\rangle$  de l'équation de SCHRÖDINGER (6.5.25) p. 238 se décompose sur cette base :

$$|\Upsilon_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_{n_1 \dots n_d}^{\infty} \mathcal{A}_{\mathbf{k}}^{(n_1 \dots n_d)} |\Phi_{n_1 \dots n_d}\rangle, \quad (6.6.2)$$

et en effectuant un produit scalaire au sens de DIRAC de l'équation de SCHRÖDINGER (6.5.25) avec la fonction de base  $|\Phi_{n'_1 \dots n'_d}\rangle$ , nous avons

$$\sum_{n_1 \dots n_d}^{\infty} \mathcal{A}_{\mathbf{k}}^{(n_1 \dots n_d)} \langle \Phi_{n'_1 \dots n'_d} | \hat{\mathcal{H}} | \Phi_{n_1 \dots n_d} \rangle = \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \sum_{n_1 \dots n_d}^{\infty} \mathcal{A}_{\mathbf{k}}^{(n_1 \dots n_d)} \langle \Phi_{n'_1 \dots n'_d} | \Phi_{n_1 \dots n_d} \rangle. \quad (6.6.3)$$

En posant

$$\mathcal{H}_{(n_1 \dots n_d)}^{(n'_1 \dots n'_d)} = \langle \Phi_{n'_1 \dots n'_d} | \hat{\mathcal{H}} | \Phi_{n_1 \dots n_d} \rangle, \quad (6.6.4)$$

nous pouvons écrire

$$\sum_{n_1 \dots n_d}^{\infty} \mathcal{H}_{(n_1 \dots n_d)}^{(n'_1 \dots n'_d)} \mathcal{A}_{\mathbf{k}}^{(n_1 \dots n_d)} = \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \sum_{n_1 \dots n_d}^{\infty} \mathcal{O}_{(n_1 \dots n_d)}^{(n'_1 \dots n'_d)} \mathcal{A}_{\mathbf{k}}^{(n_1 \dots n_d)}. \quad (6.6.5)$$

Les deux  $d$ -uplets  $(n_1, \dots, n_d)$  et  $(n'_1, \dots, n'_d)$  sont associés respectivement aux deux entiers naturels  $n$  et  $n'$  par une bijection de type lexicographique. Ainsi

$$\mathcal{H}_n^{n'} \equiv \mathcal{H}_{(n_1 \dots n_d)}^{(n'_1 \dots n'_d)}, \quad \mathcal{O}_n^{n'} \equiv \mathcal{O}_{(n_1 \dots n_d)}^{(n'_1 \dots n'_d)} \quad \text{et} \quad \mathcal{A}_{\mathbf{k}}^n = \mathcal{A}_{\mathbf{k}}^{(n_1 \dots n_d)}, \quad (6.6.6)$$

et l'équation (6.6.5) devient

$$\sum_n^{\infty} \mathcal{H}_n^{n'} \mathcal{A}_{\mathbf{k}}^n = \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \sum_n^{\infty} \mathcal{O}_n^{n'} \mathcal{A}_{\mathbf{k}}^n \quad \text{ou} \quad \mathcal{H} \mathcal{A}_{\mathbf{k}} = \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \mathcal{O} \mathcal{A}_{\mathbf{k}}, \quad (6.6.7)$$

qui est l'équation d'un problème généralisé aux valeurs propres pour les matrices  $\mathcal{H}$  et  $\mathcal{O}$ . Les vecteurs propres sont les  $\mathcal{A}_k$  associés aux valeurs propres  $\mathcal{E}_k$ . Il ne reste plus qu'à calculer les éléments de matrice  $\mathcal{H}_n^{n'}$  et  $\mathcal{O}_n^{n'}$ , et à effectuer la diagonalisation généralisée. La manière de calculer les éléments de matrice a été donnée dans la section 6.4 p. 235, et pour cela nous devons maintenant expliciter les fonctions de base.

Ces fonctions de base sont solutions de l'équation de SCHRÖDINGER de l'oscillateur harmonique anisotrope de dimension  $d$  dans un espace euclidien tangent à l'extension en configuration, dont le hamiltonien est

$$\hat{\mathcal{H}}^{\text{ho}} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^d \frac{1}{m_i} \frac{\partial^2}{\partial q^i{}^2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d C_i (q^i - q_{\text{eq}}^i)^2. \quad (6.6.8)$$

En effectuant le changement de variable

$$\xi^i = \beta^i (q^i - q_{\text{eq}}^i), \quad (6.6.9)$$

avec

$$\omega_i = \sqrt{\frac{C_i}{m_i}} \quad \text{et} \quad \beta^i = \sqrt{\frac{m_i \omega_i}{\hbar}}, \quad (6.6.10)$$

nous ramenons ce hamiltonien sous une forme canonique dont les fonctions propres sont parfaitement connues :

$$\hat{\mathcal{H}}^{\text{ho}} = \sum_{i=1}^d \frac{\hbar \omega_i}{2} \left( -\frac{\partial^2}{\partial \xi^i{}^2} + \xi^i{}^2 \right). \quad (6.6.11)$$

Dans l'espace euclidien tangent, la métrique est

$$B_{ij}^{\text{ho}}(q^1, \dots, q^d) = m_i \delta_{ij} \quad \text{et} \quad B^{\text{ho}}(q^1, \dots, q^d) = \prod_{i=1}^d m_i. \quad (6.6.12)$$

Les solutions propres de ce hamiltonien sont

$$\Phi_{n_1 \dots n_d}(\xi^1, \dots, \xi^d) = \prod_{i=1}^d H_{n_i}^{(0)}(\xi^i) \frac{e^{-\frac{\xi^i{}^2}{2}}}{\sqrt[4]{m_i}}, \quad (6.6.13)$$

où les fonctions  $H_{n_i}^{(0)}(\xi^i)$  sont les polynômes de HERMITE normalisés. Le calcul des éléments de matrice est maintenant explicite en posant  $g(\xi^1, \dots, \xi^d) = B(q^1, \dots, q^d)$  :

$$\mathcal{H}_n^{n'} = \int_{\mathbb{R}^d} d\xi^1 \dots d\xi^d \sqrt{g(\xi^1, \dots, \xi^d)} \prod_{i=1}^d H_{n_i}^{(0)}(\xi^i) \frac{e^{-\frac{\xi^i{}^2}{2}}}{\sqrt[4]{m_i}} \mathcal{H} \prod_{j=1}^d H_{n_j}^{(0)}(\xi^j) \frac{e^{-\frac{\xi^j{}^2}{2}}}{\sqrt[4]{m_j}}, \quad (6.6.14)$$

$$\mathcal{O}_n^{n'} = \int_{\mathbb{R}^d} d\xi^1 \dots d\xi^d \sqrt{g(\xi^1, \dots, \xi^d)} \prod_{i=1}^d H_{n_i}^{(0)}(\xi^i) H_{n_i}^{(0)}(\xi^i) \frac{e^{-\xi^i{}^2}}{\sqrt{m_i}}. \quad (6.6.15)$$

Nous l'effectuons avec la méthode de quadrature de GAUSS-HERMITE. Il reste à trouver le meilleur oscillateur harmonique anisotrope afin de pouvoir tronquer la somme infinie sur la base



de manière raisonnable, et ainsi, de pouvoir demander le calcul à un ordinateur. Nous disposons de  $2d$  paramètres ajustables, les  $d$  masses  $m_i$  et les  $d$  raideurs  $C_i$ . Cependant il faut être conscient que le caractère non euclidien de l'espace collectif rend la convergence des méthodes d'intégration plus délicates, et nous sommes limités dans le nombre de dimensions utilisables (limités en pratique à quatre dimensions). Pour nous assurer que la méthode d'intégration est correctement programmée, nous avons programmé le calcul de deux manières formellement équivalentes en utilisant deux formes du laplacien qui intervient dans l'énergie cinétique, et rend le calcul très délicat. Ces deux formes du laplacien sont, d'une part,

$$\Delta f = \frac{B^{ij} B^{k\ell} - 2B^{j\ell} B^{ik}}{2} \frac{\partial B_{k\ell}}{\partial q^i} \frac{\partial f}{\partial q^j} + B^{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial q^i \partial q^j}, \quad (6.6.16)$$

et d'autre part,

$$\Delta f = \frac{1}{\sqrt{B}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left( \sqrt{B} B^{ij} \frac{\partial f}{\partial q^j} \right). \quad (6.6.17)$$

Le tableau 6.1 résume les plus grands écarts entre les éléments de matrice obtenus par chacune des deux méthodes, qui sont de l'ordre de  $1 \times 10^{-14}$  en écart relatif. Nous avons donc des calculs limités par la précision de la machine.

| Indice $m$ | Indice $n$ | $T_{mn}$ par la première forme | $T_{mn}$ par la seconde forme | Écart relatif             |
|------------|------------|--------------------------------|-------------------------------|---------------------------|
| 22         | 7          | 0,518 049 998 334 507 2        | -0,518 049 998 334 507 3      | $-2,1431 \times 10^{-14}$ |
| 28         | 7          | 0,537 479 799 998 262 2        | 0,537 479 799 998 262 3       | $-2,0656 \times 10^{-14}$ |
| 34         | 7          | -0,541 107 173 429 533 7       | -0,541 107 173 429 533 8      | $-2,0518 \times 10^{-14}$ |
| 21         | 8          | -0,520 199 080 455 366 6       | -0,520 199 080 455 366 7      | $-2,1342 \times 10^{-14}$ |
| 27         | 8          | 0,539 069 312 152 669 0        | 0,539 069 312 152 669 1       | $-2,0595 \times 10^{-14}$ |
| 33         | 8          | -0,542 342 798 186 634 7       | -0,542 342 798 186 634 8      | $-2,0471 \times 10^{-14}$ |
| 28         | 13         | -0,527 194 565 561 964 9       | -0,527 194 565 561 965 0      | $-2,1059 \times 10^{-14}$ |
| 34         | 13         | 0,540 147 033 829 999 1        | 0,540 147 033 829 999 2       | $-2,0554 \times 10^{-14}$ |
| 21         | 14         | 0,500 232 374 961 577 0        | 0,500 232 374 961 577 1       | $-2,2194 \times 10^{-14}$ |
| 27         | 14         | -0,534 452 437 577 344 6       | -0,534 452 437 577 344 7      | $-2,0773 \times 10^{-14}$ |
| 33         | 14         | 0,546 869 547 520 556 1        | 0,546 869 547 520 556 2       | $-2,0301 \times 10^{-14}$ |
| 33         | 20         | -0,502 130 726 603 265 3       | -0,502 130 726 603 265 4      | $-2,2110 \times 10^{-14}$ |

Tableau 6.1 – Comparaison d'éléments de matrice de l'énergie cinétique par deux voies d'intégration différentes

Nous nous assurons également de la validité de la résolution numérique par une confrontation à une résolution analytique dans un cas à une dimension qui le permet. Dans une situation à une dimension, l'équation de SCHRÖDINGER collective (6.5.25) p. 238 devient, conformément à l'équation (A<sub>6</sub>.12) p. 246,

$$-\frac{\hbar^2}{2\sqrt{B}} \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{\sqrt{B}} \frac{d\Upsilon_{\mathbf{k}}}{dx} \right) + \mathcal{E}_0(x) \Upsilon_{\mathbf{k}} = \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \Upsilon_{\mathbf{k}}. \quad (6.6.18)$$

Les détails pour obtenir une résolution analytique sont donnés dans l'annexe B<sub>6</sub> p. 251 et nous l'avons appliquée au cas

$$B(x) = \frac{A^2}{Q^2 + x^2}, \quad \mathcal{E}_0(x) = -U_0 \frac{Q^2}{Q^2 + x^2}, \quad (6.6.19)$$

pour lequel

$$\mathcal{E}_k = -\frac{\hbar^2}{8A^2} \left[ -(2k+1) + \sqrt{1 + \frac{8A^2U_0}{\hbar^2}} \right]^2 \quad \text{pour} \quad 0 \leq k \leq \frac{1}{2} \left[ -1 + \sqrt{1 + \frac{8A^2U_0}{\hbar^2}} \right]. \quad (6.6.20)$$

Le tableau 6.2 nous permet de comparer les résultats numériques avec les résultats analytiques, suite à une intégration par la quadrature de GAUSS-HERMITE et à une diagonalisation généralisée. Dans le cas où  $U_0 = 5,000 \text{ MeV}$ ,  $A^2 = 7,000 \hbar^2 \cdot \text{MeV}^{-1}$  et  $Q = 0,3000$  il y a huit états liés, et numériquement, nous trouvons six états liés pour une base tronquée à douze polynômes de HERMITE, avec soixante-dix nœuds de GAUSS pour une base d'oscillateur harmonique de raideur  $C = 40,00 \text{ MeV}$  et de masse  $M = 77,78 \hbar^2 \cdot \text{MeV}^{-1}$ . Les résultats obtenus sont très

| Indice $k$ | $\mathcal{E}_k$ analytique / MeV | $\mathcal{E}_k$ numérique / MeV | Écart relatif / % |
|------------|----------------------------------|---------------------------------|-------------------|
| 0          | -4,437                           | -4,437                          | 0,000             |
| 1          | -3,383                           | -3,382                          | -0,006            |
| 2          | -2,471                           | -2,469                          | -0,083            |
| 3          | -1,702                           | -1,684                          | -1,055            |
| 4          | -1,0762                          | -0,9268                         | -13,88            |
| 5          | -0,5931                          | -0,1832                         | -68,68            |

Tableau 6.2 – Comparaison des énergies analytiques et numériques

probants pour les premiers états liés, avec une erreur relative de l'ordre de 0,1 %. Pour les états presque libres, la précision absolue reste acceptable mais, évidemment, l'erreur relative s'aggrave puisque la valeur exacte, qui s'approche de zéro, intervient au dénominateur de cette dernière. Dans une situation réelle, non résoluble analytiquement, nous connaissons le tenseur de masse et l'énergie potentielle collective sur un maillage régulier de l'espace collectif, et il faut procéder à une interpolation pour obtenir leurs valeurs aux nœuds de GAUSS. Cette interpolation peut être une source nouvelle d'erreur et doit être rigoureusement contrôlée.

Notre intérêt est maintenant de choisir des dimensions en rapport avec les symétries utilisées actuellement,  $\alpha_2^0$ ,  $\alpha_2^2$ ,  $\alpha_3^0$ , et celles en rapport avec les symétries de haut rang,  $\alpha_3^2$  pour le tétraèdre, ou  $\alpha_4^0$  et  $\alpha_4^4$  lié à  $\alpha_4^0$  pour l'octaèdre et le cube, ou encore  $\alpha_6^0$  et  $\alpha_6^5$  lié à  $\alpha_6^0$  pour l'icosaèdre et le dodécaèdre. Pour le moment, le plus simple est d'étudier ce qui se produit dans l'espace  $\{\alpha_2^0, \alpha_2^2, \alpha_3^0, \alpha_3^2\}$  afin de déterminer la déformation et donc la symétrie la plus probable d'un noyau, et aussi de voir quelle est l'évolution de la forme en calculant

$$\langle \alpha_\lambda^\mu \rangle (t; \tau) = \langle \Upsilon(t) | \hat{\alpha}_\lambda^\mu | \Upsilon(t) \rangle \quad \text{pour} \quad \alpha_\lambda^\mu \in \{\alpha_2^0, \alpha_2^2, \alpha_3^0, \alpha_3^2\}. \quad (6.6.21)$$

La programmation de ces calculs est en cours et doit donner lieu à des publications.

Ce travail, certes encore inachevé, est arrivé à un point où nous devons conclure.

## Annexes du chapitre 6



## Annexe A<sub>6</sub>

# Les équations de SCHRÖDINGER dont la masse dépend de la position

Nous avons établi l'équation de SCHRÖDINGER dans son cadre spatial originel, les espaces de RIEMANN. Les règles de quantification données dans la proposition 21 p. 233 sont

$$q^i \rightarrow \hat{q}^i = q^i \hat{1} \quad p_i \rightarrow \hat{p}_i = -i\hbar \nabla_i, \quad (\text{A}_6.1)$$

où le symbole  $\nabla_i$  représente la dérivée covariante. Cette dérivée covariante n'est pas la dérivée partielle  $\frac{\partial}{\partial q^i}$  et son expression dépend de ce à quoi elle s'applique.

Avec les règles de quantification nous sommes arrivés à l'expression de l'énergie cinétique

$$T \rightarrow \hat{T} = \frac{1}{2} M^{ij} \hat{p}_i \hat{p}_j, \quad (\text{A}_6.2)$$

qui devient finalement

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta, \quad (\text{A}_6.3)$$

avec

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left( \sqrt{M} M^{ij} \frac{\partial}{\partial q^j} \right) \quad (\text{A}_6.4)$$

et

$$M = \det M_{ij}. \quad (\text{A}_6.5)$$

Si nous considérons, pour simplifier, un espace à une seule dimension, alors nous avons

$$x \equiv q^i, \quad (\text{A}_6.6)$$

et nous avons les égalités où nous conservons la notation en indice pour une raison qui va apparaître un peu plus loin :

$$M_{ij} \equiv M_{11} \equiv M_{xx} = M \quad (\text{A}_6.7)$$

$$M^{ij} \equiv M^{11} \equiv M^{xx} = \frac{1}{M} \quad (\text{A}_6.8)$$

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (\text{A}_6.9)$$

mais par contre les égalités dans (A<sub>6.7</sub>) et (A<sub>6.8</sub>) ne sont absolument pas des identités :

$$M_{ij} \neq M \quad (\text{A}_6.10)$$

$$M^{ij} \neq \frac{1}{M} \quad (\text{A}_6.11)$$

car, bien que le tenseur de masse  $M_{ij}$  ne soit constitué que d'un seul nombre, en l'occurrence  $M_{xx}$ , qui se trouve être égal numériquement à  $M$ ,  $M_{ij}$  conserve son statut de tenseur deux fois covariant. Dans ce cas unidimensionnel, l'équation de SCHRÖDINGER s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + V\Psi. \quad (\text{A}_6.12)$$

L'équation de SCHRÖDINGER, dans sa forme originelle, exhibe donc une masse qui dépend de la position du système dans l'espace. Or, il se trouve qu'une critique est assez naturellement formulée au sujet de la forme de cette équation : la quantification n'est pas effectuée sur une forme symétrique de l'énergie cinétique classique. Si nous voulons une expression symétrique, il faudrait écrire

$$\hat{T} = \frac{1}{2} \hat{p}_i M^{ij} \hat{p}_j, \quad (\text{A}_6.13)$$

mais avec la difficulté que l'opérateur  $\hat{p}_i$  agit maintenant aussi sur  $M^{ij}$ .

Par ailleurs, on utilise régulièrement des équations de SCHRÖDINGER avec une masse dépendante de la position du système dans l'espace, en particulier en physique du solide. Dans ce contexte, l'espace est souvent réduit à une dimension. Dans un excellent article paru en 1995, Jean-Marc LÉVY-LEBLOND fit le point sur les différentes formes de l'équation de SCHRÖDINGER dont la masse dépend de la position, et proposa de justifier que la forme symétrique

$$(1.3 [51] \text{ p. } 261) \quad H_{\text{kin}} = P \frac{1}{2M(X)} P,$$

que nous réécrivons dans notre contexte de notation

$$\hat{T} = \hat{p} \frac{1}{2M} \hat{p}, \quad (\text{A}_6.14)$$

soit la forme fondamentale de l'énergie cinétique par rapport à toute autre forme symétrique s'écrivant

$$\hat{T} = \frac{1}{4} (M^\alpha \hat{p} M^\beta \hat{p} M^\gamma + M^\gamma \hat{p} M^\beta \hat{p} M^\alpha) \quad \text{avec} \quad \alpha + \beta + \gamma = -1. \quad (\text{A}_6.15)$$

Jean-Marc LÉVY-LEBLOND écarta la forme

$$\hat{T} = \frac{1}{2M} \hat{p}^2, \quad (\text{A}_6.16)$$

qui est celle que nous avons utilisée pour écrire l'équation de SCHRÖDINGER collective, en arguant que cette forme n'est pas hermitique puisque  $\hat{p}$  ne commute pas avec  $M$  qui dépend de  $x$ . Ainsi donc, plus généralement, l'opérateur covariant que nous avons écrit

$$\hat{T} = \frac{1}{2} M^{ij} \hat{p}_i \hat{p}_j \quad (\text{A}_6.17)$$

ne pourrait pas convenir, puisqu'il présenterait aussitôt le symptôme fâcheux de ne pas être une observable. Avant de montrer comment nous nous sortons de ce mauvais pas, nous devons remarquer que dans son article Jean-Marc LÉVY-LEBLOND ne précisa pas l'expression de l'opérateur  $\hat{p}$  dans la représentation spatiale, mais les deux équations

$$(3.11 [51] \text{ p. } 261) \quad H = \frac{1}{2}P \frac{1}{M(X)}P + W_0(X)$$

et

$$(4.1 [51] \text{ p. } 261) \quad i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{M(x)} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] + W(x)\Psi$$

nous montrent tout d'abord qu'il choisit un système d'unités avec

$$\hbar = 1 \quad (\text{A}_6.18)$$

et qu'avec ce système d'unités, il considéra que

$$P = -i \frac{\partial}{\partial x}, \quad (\text{A}_6.19)$$

soit en rétablissant le système international d'unités et notre notation

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (\text{A}_6.20)$$

L'équation de SCHRÖDINGER, qu'il utilisa, est avec nos notations

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{M} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + V\Psi. \quad (\text{A}_6.21)$$

Cela est bien différent des équations covariantes que nous avons écrites

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla_x \quad (\text{A}_6.22)$$

et, p. 246,

$$(\text{A}_6.12) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + V\Psi.$$

Or, il serait erroné, même dans un espace à une seule dimension, de confondre en général  $\nabla_x$  et  $\frac{\partial}{\partial x}$  ou, dit autrement, de considérer que les scalaires, vecteurs et tenseurs ne se distinguent plus dans un espace à une seule dimension. Concernant la dérivation appliquée à un scalaire, nous avons bien sûr

$$\nabla_x \Psi = \frac{\partial \Psi}{\partial x}, \quad (\text{A}_6.23)$$

mais  $\nabla_x \Psi$  acquiert le statut de vecteur covariant dans un espace à une seule dimension. C'est pourquoi l'action d'une seconde dérivation a des effets très différents :

$$\nabla_x \nabla_x \Psi = \frac{\partial \nabla_x \Psi}{\partial x} - \Gamma_{xx}^x \nabla_x \Psi \quad (\text{A}_6.24)$$

$$= \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Gamma_{xx}^x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \neq \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}, \quad (\text{A}_6.25)$$

avec

$$\Gamma_{xx}^x = \frac{1}{2M} \frac{dM}{dx}. \quad (\text{A}_6.26)$$

Il semble donc bien que nous soyons dans une impasse. L'équation que nous avons écrite ne serait pas soutenue par un statut d'observable et celle qu'écrit Jean-Marc LÉVY-LEBLOND (nous lui attribuons cette équation par simple commodité d'expression) ne serait pas soutenue par un statut covariant. Pour y voir plus clair, nous allons développer trois équations de SCHRÖDINGER : l'équation covariante que nous avons écrite, celle de Jean-Marc LÉVY-LEBLOND et une troisième, qui pourrait tout concilier.

Tout d'abord celle que nous avons écrite, (A<sub>6.12</sub>) p. 246, devient

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + V\Psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{\sqrt{M}} \right) \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \end{aligned} \quad (\text{A}_6.27)$$

$$= \frac{\hbar^2}{4M^2} \frac{dM}{dx} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi; \quad (\text{A}_6.28)$$

ensuite celle de Jean-Marc LÉVY-LEBLOND, (A<sub>6.21</sub>) p. 247, devient

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{M} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + V\Psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{M} \right) \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \end{aligned} \quad (\text{A}_6.29)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2M^2} \frac{dM}{dx} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi; \quad (\text{A}_6.30)$$

et enfin en reprenant la forme symétrique prônée par Jean-Marc LÉVY-LEBLOND, mais en utilisant la dérivée covariante

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{p} \frac{1}{2M} \hat{p} \Psi + V\Psi \quad (\text{A}_6.31)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2} \nabla_x \left( \frac{1}{M} \nabla_x \Psi \right) + V\Psi \quad (\text{A}_6.32)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2} \nabla_x \left( \frac{1}{M} \right) \nabla_x \Psi - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_x \nabla_x \Psi + V\Psi \quad (\text{A}_6.33)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2} \nabla_x \left( \frac{1}{M} \right) \nabla_x \Psi - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{4M^2} \frac{dM}{dx} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + V\Psi. \quad (\text{A}_6.34)$$

Nous avons pris soin de ne pas nous précipiter sur  $\nabla_x \left( \frac{1}{M} \right)$  car nous devons nous souvenir que le statut de  $\frac{1}{M}$  n'est pas celui d'un scalaire, malgré les apparences fort trompeuses, mais celui d'un tenseur deux fois contravariant. Alors, avec l'expression du symbole de CHRISTOFFEL donnée en (A<sub>6.26</sub>)

$$\nabla_x \left( \frac{1}{M} \right) = \nabla_x M^{xx} = \frac{\partial M^{xx}}{\partial x} + \Gamma_{xx}^x M^{xx} + \Gamma_{xx}^x M^{xx} \quad (\text{A}_6.35)$$



$$= \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{M} \right) + 2 \times \frac{1}{2M} \frac{dM}{dx} \frac{1}{M} \quad (\text{A}_6.36)$$

$$= -\frac{1}{M^2} \frac{dM}{dx} + \frac{1}{M^2} \frac{dM}{dx} \quad (\text{A}_6.37)$$

$$= 0, \quad (\text{A}_6.38)$$

et nous reconnaissons ce résultat déjà vu au chapitre 5 que la dérivée covariante de la métrique est nulle. Alors cette troisième équation devient simplement

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{4M^2} \frac{dM}{dx} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi, \quad (\text{A}_6.39)$$

qui est identique en tout point à celle que nous avons écrite puis développée en (A<sub>6.28</sub>) p. 248. En fait, il n'y a rien d'étonnant à cela puisque l'argument de Jean-Marc LÉVY-LEBLOND contre l'équation non symétrique tombe instantanément du fait que la dérivée covariante de la métrique est nulle. Ainsi en réalité  $\hat{p}$  commute avec  $M$ . Et du coup la forme générale

$$\hat{T} = \frac{1}{4} (M^\alpha \hat{p} M^\beta \hat{p} M^\gamma + M^\gamma \hat{p} M^\beta \hat{p} M^\alpha) \quad \text{avec} \quad \alpha + \beta + \gamma = -1 \quad (\text{A}_6.40)$$

devient identique à la forme que nous avons écrite dès le début :

$$\hat{T} = -\frac{1}{2M} \hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta. \quad (\text{A}_6.41)$$

Arrivons-en, pour terminer, à l'argument qui permettait à Jean-Marc LÉVY-LEBLOND de trancher en faveur de la forme symétrique ( $\alpha = 0, \beta = -1, \gamma = 0$ ) et qui, désormais, n'est plus privilégiée, de même qu'aucune autre forme, pourvu qu'elle respecte la covariance. Son argument était fondé sur les conditions de continuité et doit plutôt être considéré comme une propriété de l'équation de SCHRÖDINGER dont la masse dépend de la position. Une telle équation est utilisée en physique du solide et en physique nucléaire pour des raisons différentes. En physique nucléaire, elle sert à traiter du mouvement collectif du noyau ou bien dans la théorie HARTREE-FOCK. En physique du solide, elle est utile pour tenir compte de la masse effective de l'électron ou d'un trou dans un solide. Dans ce cas, l'existence d'une jonction, comme dans une diode ou dans un transistor, fait apparaître une discontinuité de la masse effective. Il est alors important de préciser les conditions de continuité de la fonction d'onde. Nous reprenons l'équation covariante, p. 246,

$$(\text{A}_6.12) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + V\Psi,$$

que nous transformons en

$$\frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = -\frac{2i}{\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{2V}{\hbar} \Psi. \quad (\text{A}_6.42)$$

Nous intégrons cette équation entre  $x_0 - \epsilon$  et  $x_0 + \epsilon$  donc

$$\int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} \sqrt{M} dx \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} \sqrt{M} dx \left( -\frac{2i}{\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{2V}{\hbar} \Psi \right), \quad (\text{A}_6.43)$$

qui devient

$$\int_{x_{0-\epsilon}}^{x_{0+\epsilon}} dx \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = \int_{x_{0-\epsilon}}^{x_{0+\epsilon}} \sqrt{M} dx \left( -\frac{2i}{\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{2V}{\hbar} \Psi \right), \quad (\text{A}_6.44)$$

dont le membre de gauche s'intègre immédiatement ; et ainsi

$$\frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Big|_{x_{0-\epsilon}}^{x_{0+\epsilon}} = \int_{x_{0-\epsilon}}^{x_{0+\epsilon}} dx \left( -\frac{2i\sqrt{M}}{\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{2V\sqrt{M}}{\hbar} \Psi \right). \quad (\text{A}_6.45)$$

Dans la mesure où l'intégrande est intégrable, en faisant tendre  $\epsilon$  vers 0, l'intégrale du membre de droite disparaît et nous obtenons

$$\frac{1}{\sqrt{M}(x_{0+})} \frac{\partial \Psi}{\partial x}(x_{0+}, t) = \frac{1}{\sqrt{M}(x_{0-})} \frac{\partial \Psi}{\partial x}(x_{0-}, t). \quad (\text{A}_6.46)$$

Cette dernière équation signifie que  $\frac{1}{\sqrt{M}} \frac{\partial \Psi}{\partial x}$  est continue et induit aussi que  $\Psi$  est continue. Ces conditions de continuité diffèrent de celles que trouve Jean-Marc LÉVY-LEBLOND.

## Annexe B<sub>6</sub>

# Cas d'une résolution exacte de l'équation de SCHRÖDINGER dont la masse dépend de la position

Nous proposons de montrer comment, dans un espace à une dimension, ramener l'équation de SCHRÖDINGER dont la masse dépend de la position à une équation de SCHRÖDINGER dont la masse est constante, ouvrant ainsi la possibilité d'une résolution exacte dans des cas particuliers bien choisis.

Nous considérons l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire, mais celle dont la masse dépend de la position

$$-\frac{\hbar^2}{2\sqrt{m}} \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{\sqrt{m}} \frac{d\psi}{dx} \right) + V\psi = E\psi, \quad (\text{B}_6.1)$$

qui devient en développant

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{4} \frac{m'}{m^2} \frac{d\psi}{dx} + V\psi = E\psi, \quad (\text{B}_6.2)$$

et nous effectuons un changement de variable selon les modalités suivantes :

$$x = f(\tilde{x}), \quad (\text{B}_6.3)$$

$$\psi(x) = g(\tilde{x})\tilde{\psi}(\tilde{x}), \quad (\text{B}_6.4)$$

$$m(x) = m(f(\tilde{x})) = \tilde{m}(\tilde{x}) \quad (\text{B}_6.5)$$

et

$$V(x) = V(f(\tilde{x})) = V \circ f(\tilde{x}). \quad (\text{B}_6.6)$$

Avec la formule de dérivation des fonctions réciproques

$$\frac{d\tilde{x}}{dx} = \frac{1}{f'(\tilde{x})}, \quad \frac{d^2\tilde{x}}{dx^2} = -\frac{f''(\tilde{x})}{f'^3(\tilde{x})} \quad (\text{B}_6.7)$$

et en utilisant la formule de dérivation de Bienheureux Francesco FAÀ DI BRUNO

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\tilde{x}}{dx} \frac{d(g\tilde{\psi})}{d\tilde{x}} = \frac{1}{f'} \left( g'\tilde{\psi} + g \frac{d\tilde{\psi}}{d\tilde{x}} \right), \quad (\text{B}_6.8)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left( \frac{d\tilde{x}}{dx} \right)^2 \frac{d^2(g\tilde{\psi})}{d\tilde{x}^2} + \frac{d^2\tilde{x}}{dx^2} \frac{d(g\tilde{\psi})}{d\tilde{x}} = \frac{1}{f'^2} \left( g''\tilde{\psi} + 2g' \frac{d\tilde{\psi}}{d\tilde{x}} + g \frac{d^2\tilde{\psi}}{d\tilde{x}^2} \right) - \frac{f''}{f'^3} \left( g'\tilde{\psi} + g \frac{d\tilde{\psi}}{d\tilde{x}} \right) \quad (\text{B}_6.9)$$

et

$$m' = \frac{\tilde{m}'}{f'}, \quad (\text{B}_6.10)$$

nous transformons l'équation de SCHRÖDINGER dans le nouveau système de coordonnées, puis en divisant par  $g$  nous obtenons

$$-\frac{\hbar^2}{2\tilde{m}f'^2} \left[ \frac{d^2\tilde{\psi}}{d\tilde{x}^2} + \left( \frac{2g'}{g} - \frac{f''}{f'} - \frac{\tilde{m}'}{2\tilde{m}} \right) \frac{d\tilde{\psi}}{d\tilde{x}} + \left( \frac{g''}{g} - \frac{f''g'}{f'g} - \frac{\tilde{m}'g'}{2\tilde{m}g} \right) \tilde{\psi} \right] + V \circ f \tilde{\psi} = E \tilde{\psi}. \quad (\text{B}_6.11)$$

Nous nous inspirons alors de la méthode proposée dans [52] (bibliographie p. 261) et nous choisissons le changement de variable plus précis

$$g(\tilde{x}) \propto (f'(\tilde{x})\tilde{m}(\tilde{x}))^\alpha, \quad f'(\tilde{x}) = \left( \frac{m_0}{\tilde{m}(\tilde{x})} \right)^\beta. \quad (\text{B}_6.12)$$

De ce choix, il résulte que

$$\frac{f''}{f'} = -\beta \frac{\tilde{m}'}{\tilde{m}}, \quad (\text{B}_6.13)$$

$$\frac{g'}{g} = \alpha \left( \frac{f''}{f'} + \frac{\tilde{m}'}{\tilde{m}} \right) = \alpha(1-\beta) \frac{\tilde{m}'}{\tilde{m}}, \quad (\text{B}_6.14)$$

et

$$\frac{g''}{g} = \alpha(1-\beta) \left[ \frac{\tilde{m}''}{\tilde{m}} + (\alpha(1-\beta) - 1) \frac{\tilde{m}'^2}{\tilde{m}^2} \right]. \quad (\text{B}_6.15)$$

Alors le facteur devant  $\frac{d\tilde{\psi}}{d\tilde{x}}$  devient

$$\frac{2g'}{g} - \frac{f''}{f'} - \frac{\tilde{m}'}{2\tilde{m}} = \left[ 2\alpha(1-\beta) + \beta - \frac{1}{2} \right] \frac{\tilde{m}'}{\tilde{m}} \quad (\text{B}_6.16)$$

et celui devant  $\tilde{\psi}$

$$\frac{g''}{g} - \frac{f''g'}{f'g} - \frac{\tilde{m}'g'}{2\tilde{m}g} = \alpha(1-\beta) \left[ \frac{\tilde{m}''}{\tilde{m}} + \left( \alpha(1-\beta) + \beta - \frac{3}{2} \right) \frac{\tilde{m}'^2}{\tilde{m}^2} \right]. \quad (\text{B}_6.17)$$

L'équation (B<sub>6.11</sub>) s'écrit maintenant

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0^{2\beta}\tilde{m}^{2\beta-1}} \frac{d^2\tilde{\psi}}{d\tilde{x}^2} - \frac{\hbar^2}{2m_0^{2\beta}\tilde{m}^{2\beta-1}} \left[ 2\alpha(1-\beta) + \beta - \frac{1}{2} \right] \frac{\tilde{m}'}{\tilde{m}} \frac{d\tilde{\psi}}{d\tilde{x}} + \tilde{V}\tilde{\psi} = E\tilde{\psi} \quad (\text{B}_6.18)$$

avec une nouvelle énergie potentielle

$$\tilde{V} = -\frac{\hbar^2}{2m_0^{2\beta}} \tilde{m}^{2\beta-1} \alpha(1-\beta) \left[ \frac{\tilde{m}''}{\tilde{m}} + \left( \alpha(1-\beta) + \beta - \frac{3}{2} \right) \frac{\tilde{m}'^2}{\tilde{m}^2} \right] + V \circ f. \quad (\text{B}_6.19)$$

Afin de retrouver une équation de SCHRÖDINGER plus « classique » nous devons contraindre  $\alpha$  et  $\beta$  en imposant que  $m_0$  intervienne à la puissance  $-1$  devant  $\frac{d^2\tilde{\psi}}{d\tilde{x}^2}$  et que le facteur devant  $\frac{d\tilde{\psi}}{d\tilde{x}}$  soit nul

$$\begin{cases} \beta = \frac{1}{2} \\ 2\alpha(1-\beta) + \beta - \frac{1}{2} = 0 \end{cases} \quad (\text{B}_6.20)$$

c'est-à-dire

$$\begin{cases} \beta = \frac{1}{2} \\ \alpha = 0. \end{cases} \quad (\text{B}_6.21)$$

Alors l'équation (B<sub>6</sub>.18) p. 252 devient

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\tilde{\psi}}{d\tilde{x}^2} + \tilde{V}\tilde{\psi} = E\tilde{\psi} \quad (\text{B}_6.22)$$

avec simplement

$$\tilde{V} = V \circ f. \quad (\text{B}_6.23)$$

Nous avons bien obtenu une équation de SCHRÖDINGER dont la masse est constante ; l'énergie potentielle a cependant dû être modifiée. En choisissant judicieusement une loi de masse  $m(x)$  et une énergie potentielle  $\tilde{V}(\tilde{x})$ , cette équation peut être résolue analytiquement. Nous avons alors un moyen de tester un programme de résolution numérique de l'équation de SCHRÖDINGER dépendante de la masse. Sinon, il reste possible de réaliser une double résolution numérique. Dans les deux cas, nous pouvons contrôler la pertinence de la résolution directe. Explicitons le changement de variable :

$$\tilde{x} = f^{-1}(x) \quad (\text{B}_6.24)$$

et

$$f'(\tilde{x}) = \sqrt{\frac{m_0}{\tilde{m}(\tilde{x})}} = \frac{dx}{d\tilde{x}}; \quad (\text{B}_6.25)$$

alors

$$f'(\tilde{x}) = f' \circ f^{-1}(x) = \frac{1}{(f^{-1})'(x)} = \sqrt{\frac{m_0}{m(x)}} \quad (\text{B}_6.26)$$

et

$$(f^{-1})'(x) = \frac{d\tilde{x}}{dx} = \sqrt{\frac{m(x)}{m_0}}. \quad (\text{B}_6.27)$$

En intégrant, nous sommes en mesure d'expliciter le changement de variable

$$f^{-1}(x) - f^{-1}(x_0) = \int_{x_0}^x dX (f^{-1})'(X) = \int_{x_0}^x dX \sqrt{\frac{m(X)}{m_0}}. \quad (\text{B}_6.28)$$

Alors

$$\tilde{x} = f^{-1}(x) = f^{-1}(x_0) + \int_{x_0}^x dX \sqrt{\frac{m(X)}{m_0}}. \quad (\text{B}_6.29)$$

Nous choisissons

$$m(x) = \frac{A^2}{Q^2 + x^2}, \quad (\text{B}_6.30)$$

et nous allons chercher une énergie potentielle  $V$  qui conduise à une énergie potentielle  $\tilde{V}$  analytiquement soluble. Le changement de variable devient

$$\tilde{x} = f^{-1}(x_0) + \frac{A}{\sqrt{m_0}} \int_{x_0}^x dX \frac{1}{\sqrt{Q^2 + X^2}} = f^{-1}(x_0) + \frac{A}{\sqrt{m_0}} \ln\left(\sqrt{Q^2 + x^2} + x\right) \Big|_{x_0}^x, \quad (\text{B}_6.31)$$

soit

$$\tilde{x} = f^{-1}(x_0) + \frac{A}{\sqrt{m_0}} \ln\left(\frac{\sqrt{Q^2 + x^2} + x}{\sqrt{Q^2 + x_0^2} + x_0}\right). \quad (\text{B}_6.32)$$

Or,

$$\operatorname{arsinh} z = \ln\left(\sqrt{1 + z^2} + z\right), \quad (\text{B}_6.33)$$

donc

$$\ln\left(\frac{\sqrt{Q^2 + x^2} + x}{\sqrt{Q^2 + x_0^2} + x_0}\right) = \ln\left(\sqrt{Q^2 + x^2} + x\right) - \ln\left(\sqrt{Q^2 + x_0^2} + x_0\right) \quad (\text{B}_6.34)$$

$$= \ln\left(\sqrt{1 + \left(\frac{x}{Q}\right)^2} + \frac{x}{Q}\right) - \ln\left(\sqrt{1 + \left(\frac{x_0}{Q}\right)^2} + \frac{x_0}{Q}\right) \quad (\text{B}_6.35)$$

$$= \operatorname{arsinh}\left(\frac{x}{Q}\right) - \operatorname{arsinh}\left(\frac{x_0}{Q}\right), \quad (\text{B}_6.36)$$

puis

$$\tilde{x} = f^{-1}(x_0) + \frac{A}{\sqrt{m_0}} \operatorname{arsinh}\left(\frac{x}{Q}\right) - \frac{A}{\sqrt{m_0}} \operatorname{arsinh}\left(\frac{x_0}{Q}\right) \quad (\text{B}_6.37)$$

et

$$\tilde{x}_0 = f^{-1}(x_0) - \frac{A}{\sqrt{m_0}} \operatorname{arsinh}\left(\frac{x_0}{Q}\right). \quad (\text{B}_6.38)$$

Nous choisissons  $x_0$  tel que

$$\tilde{x}_0 = 0 \quad (\text{B}_6.39)$$

d'où

$$\tilde{x} = \frac{A}{\sqrt{m_0}} \operatorname{arsinh}\left(\frac{x}{Q}\right) \quad (\text{B}_6.40)$$

et

$$x = Q \sinh\left(\frac{\tilde{x}}{A} \sqrt{m_0}\right). \quad (\text{B}_6.41)$$

La transformation de la masse nous donne

$$\tilde{m}(\tilde{x}) = m(x) = \frac{A^2}{Q^2 + x^2} = \frac{A^2}{Q^2 + Q^2 \sinh^2\left(\frac{\tilde{x}}{A}\sqrt{m_0}\right)} = \frac{\left(\frac{A}{Q}\right)^2}{1 + \sinh^2\left(\frac{\tilde{x}}{A}\sqrt{m_0}\right)}, \quad (\text{B}_6.42)$$

soit encore avec la relation  $\cosh^2 z - \sinh^2 z = 1$  et la sécante hyperbolique  $\operatorname{sech} z = \frac{1}{\cosh z}$

$$\tilde{m}(\tilde{x}) = \frac{\left(\frac{A}{Q}\right)^2}{\cosh^2\left(\frac{\tilde{x}}{A}\sqrt{m_0}\right)} = \left(\frac{A}{Q}\right)^2 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\tilde{x}}{A}\sqrt{m_0}\right). \quad (\text{B}_6.43)$$

Nous voulons en fait imposer une énergie potentielle  $\tilde{V}$  pour laquelle nous savons résoudre analytiquement l'équation de SCHRÖDINGER avec la masse constante et nous exprimons donc l'énergie potentielle originelle  $V$  à partir de l'énergie potentielle  $\tilde{V}$

$$V(x) = \tilde{V} \circ f^{-1}(x). \quad (\text{B}_6.44)$$

Nous choisissons l'énergie potentielle de PÖSCHL-TELLER

$$\tilde{V}(\tilde{x}) = -U_0 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\tilde{x}}{A}\sqrt{m_0}\right) = -\frac{U_0}{\cosh^2\left(\frac{\tilde{x}}{A}\sqrt{m_0}\right)}. \quad (\text{B}_6.45)$$

Et donc

$$V \circ f(\tilde{x}) = -U_0 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\tilde{x}}{A}\sqrt{m_0}\right). \quad (\text{B}_6.46)$$

En exprimant le changement de variable inverse, nous allons obtenir l'énergie potentielle  $V$  dans sa variable naturelle :

$$\frac{\tilde{x}}{A}\sqrt{m_0} = \operatorname{arsinh}\left(\frac{x}{Q}\right) \quad (\text{B}_6.47)$$

et, sachant que

$$\operatorname{sech}^2 \operatorname{arsinh} z = \frac{1}{1 + z^2}, \quad (\text{B}_6.48)$$

alors

$$\begin{aligned} V(x) &= U_0 \operatorname{sech}^2 \operatorname{arsinh}\left(\frac{x}{Q}\right) \\ &= -U_0 \frac{1}{1 + \left(\frac{x}{Q}\right)^2} \\ &= -U_0 \frac{Q^2}{Q^2 + x^2}. \end{aligned} \quad (\text{B}_6.49)$$

Finalement, pour résumer, l'équation de SCHRÖDINGER dont la masse et l'énergie potentielle dépendent de la position

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{4} \frac{m'}{m^2} \frac{d\psi}{dx} + V\psi = E\psi,$$

$$m(x) = \frac{A^2}{Q^2 + x^2}, \quad m'(x) = -\frac{2A^2x}{(Q^2 + x^2)^2}, \quad V(x) = -U_0 \frac{Q^2}{Q^2 + x^2},$$

a les mêmes solutions que l'équation de SCHRÖDINGER dont seule l'énergie potentielle dépend de la position,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\tilde{\psi}}{d\tilde{x}^2} + \tilde{V}\tilde{\psi} = E\tilde{\psi}, \quad \tilde{V}(\tilde{x}) = -\frac{U_0}{\cosh^2\left(\frac{\tilde{x}}{A}\sqrt{m_0}\right)},$$

dont les solutions analytiques sont connues (voir [53] § 23 pp. 93-94 bibliographie p. 261) :

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{8A^2} \left[ -(2n+1) + \sqrt{1 + \frac{8A^2U_0}{\hbar^2}} \right]^2 \quad \text{pour} \quad 0 \leq n \leq \frac{1}{2} \left[ -1 + \sqrt{1 + \frac{8A^2U_0}{\hbar^2}} \right]. \quad (\text{B}_6.50)$$



## Annexe C<sub>6</sub>

# Application de la mécanique quantique formulée dans les espaces de RIEMANN à l'atome de protium

L'atome de protium est plus connu sous le nom d'atome d'hydrogène 1. Par abus de langage, on l'appelle atome d'hydrogène. Cependant la terminologie est claire, l'atome de deutérium est l'atome d'hydrogène 2 dont le noyau est un deutéron, et l'atome de tritium est l'atome d'hydrogène 3 dont le noyau est un triton. Ainsi l'atome d'hydrogène 1 dont le noyau est un proton est aussi l'atome de protium. L'expression « atome d'hydrogène » ne peut être employée qu'en chimie, où la distinction isotopique n'a que peu d'importance sur les réactions chimiques. L'atome de protium est donc constitué d'un proton autour duquel tourne un électron (attention, il ne gravite pas, et d'ailleurs tourne-t-il seulement ?). Dans le cas d'un électron de charge  $-e$ , de spin  $\vec{s}$  et de masse  $m$ , situé en  $\vec{r}$  et allant à la vitesse  $\vec{v}$ , pris dans le champ central coulombien d'un proton situé en  $\vec{r}'$ , la métrique est simplement

$$M_{ij} = m\delta_{ij} \quad \text{et} \quad M^{ij} = \frac{\delta^{ij}}{m}. \quad (\text{C}_6.1)$$

Ainsi l'énergie cinétique s'écrit

$$T = \frac{1}{2}m\vec{v}^2. \quad (\text{C}_6.2)$$

L'énergie potentielle contient toute l'information sur les interactions que subit l'électron. L'électron est soumis à deux interactions électromagnétiques : l'interaction coulombienne correspondant à l'énergie potentielle

$$V_{\text{Coul}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \|\vec{r} - \vec{r}'\|^2} = V_{\text{Coul}}(\vec{r}), \quad (\text{C}_6.3)$$

et l'interaction ampérienne entre son moment magnétique orbital  $\vec{m}_\ell$  et son moment magnétique de spin  $\vec{m}_s$ , résultant en fait de l'interaction entre un des deux moments magnétiques et le champ magnétique produit par l'autre moment magnétique, par exemple  $\vec{B}_\ell$  pour le moment magnétique orbital,

$$V_{\text{Amp}} = -\vec{m}_s \cdot \vec{B}_\ell. \quad (\text{C}_6.4)$$

Il s'agit de l'interaction spin-orbite, dont nous allons obtenir l'expression sans utiliser la mécanique quantique relativiste. Dans l'interaction ampérienne, il faudrait aussi tenir compte de l'action du moment magnétique du proton. Nous savons *a posteriori* que cette interaction est négligeable, donc nous l'omettons totalement :

$$V = V_{\text{Coul}} + V_{\text{Amp}}. \quad (\text{C}_6.5)$$

Le champ magnétique créé en  $\vec{r}$  par un dipôle magnétique situé en  $\vec{r}'$  est bien connu suffisamment loin du dipôle (nous ignorons le terme de contact) :

$$\vec{B}_\ell(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3(\vec{r} - \vec{r}')(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{m}_\ell - (\vec{r} - \vec{r}')^2 \vec{m}_\ell}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^5}. \quad (\text{C}_6.6)$$

Par conséquent

$$V_{\text{Amp}} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3\vec{m}_s \cdot (\vec{r} - \vec{r}')(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{m}_\ell - (\vec{r} - \vec{r}')^2 \vec{m}_\ell \cdot \vec{m}_s}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^5}. \quad (\text{C}_6.7)$$

Compte tenu de l'existence du rapport gyromagnétique, nous avons

$$\vec{m}_\ell = -g_\ell \frac{e}{2m} \vec{\ell}, \quad \vec{m}_s = -g_s \frac{e}{2m} \vec{s}, \quad (\text{C}_6.8)$$

avec les facteurs d'Alfred LANDÉ  $g_\ell = 1$  et  $g_s = 2$ . Puis en utilisant la définition du moment cinétique orbital<sup>1</sup>

$$\vec{\ell} = (\vec{r} - \vec{r}') \wedge m\vec{v}, \quad (\text{C}_6.9)$$

nous obtenons que

$$(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{m}_\ell = 0, \quad (\text{C}_6.10)$$

ce qui réduit l'expression de l'interaction entre les deux moments magnétiques à

$$V_{\text{Amp}} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{m}_\ell \cdot \vec{m}_s}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^3} = \frac{\mu_0 g_\ell g_s e^2}{16\pi m^2} \frac{\vec{\ell} \cdot \vec{s}}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^3}. \quad (\text{C}_6.11)$$

Mais nous avons la possibilité de réexprimer le moment cinétique orbital en utilisant sa définition et la propriété

$$\vec{\nabla} \frac{1}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|} = -\frac{\vec{r} - \vec{r}'}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^3}, \quad (\text{C}_6.12)$$

donc

$$\vec{\ell} = \|\vec{r} - \vec{r}'\|^3 \vec{\nabla} \frac{-1}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|} \wedge m\vec{v}. \quad (\text{C}_6.13)$$

Alors

$$V_{\text{Amp}} = \frac{\mu_0 g_\ell g_s e^2}{16\pi m^2} \frac{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^3 \vec{\nabla} \frac{-1}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|} \wedge m\vec{v}}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^3} \cdot \vec{s} \quad (\text{C}_6.14)$$

---

1. Il y a, ici, un risque d'ambiguïté dans la définition du moment cinétique puisque nous utilisons la quantité de mouvement  $m\vec{v}$  alors qu'on aurait pu vouloir utiliser l'impulsion  $\vec{p}$  qui diffère de la quantité de mouvement.

$$= \frac{\mu_0 g_\ell g_s e^2}{16\pi m^2} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \left( \vec{\nabla} \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 \|\vec{r} - \vec{r}'\|} \wedge m\vec{v} \right) \cdot \vec{s} \quad (\text{C}_6.15)$$

$$= \frac{g_\ell g_s}{4m^2 c^2} \left( \vec{\nabla} V_{\text{Coul}} \wedge m\vec{v} \right) \cdot \vec{s} \quad (\text{C}_6.16)$$

$$= \frac{g_\ell g_s}{4mc^2} \left( \vec{s} \wedge \vec{\nabla} V_{\text{Coul}} \right) \cdot \vec{v} = V_{\text{Amp}}(\vec{r}, \vec{v}, \vec{s}), \quad (\text{C}_6.17)$$

et puisque  $V_{\text{Coul}}$  ne dépend pas de la vitesse, nous avons

$$\frac{\partial V}{\partial \vec{v}} = \frac{\partial V_{\text{Amp}}}{\partial \vec{v}} = \frac{g_\ell g_s}{4mc^2} \left( \vec{s} \wedge \vec{\nabla} V_{\text{Coul}} \right). \quad (\text{C}_6.18)$$

Nous déduisons alors l'expression de l'impulsion

$$\vec{p} = m\vec{v} - \frac{\partial V}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} - \frac{g_\ell g_s}{4mc^2} \left( \vec{s} \wedge \vec{\nabla} V_{\text{Coul}} \right), \quad (\text{C}_6.19)$$

ou réciproquement

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} + \frac{g_\ell g_s}{4m^2 c^2} \left( \vec{s} \wedge \vec{\nabla} V_{\text{Coul}} \right), \quad (\text{C}_6.20)$$

ainsi que l'énergie potentielle tenseur à partir de la définition 17 p. 194, équation (5.4.31)

$$V_{\text{ten}} = -\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial V}{\partial \vec{v}} \right)^2 = -\frac{g_\ell^2 g_s^2}{32m^3 c^4} \left( \vec{s} \wedge \vec{\nabla} V_{\text{Coul}} \right)^2 = V_{\text{ten}}(\vec{r}, \vec{s}), \quad (\text{C}_6.21)$$

et l'énergie potentielle ampérienne devient

$$V_{\text{Amp}} = \frac{g_\ell g_s}{4m^2 c^2} \left( \vec{s} \wedge \vec{\nabla} V_{\text{Coul}} \right) \cdot \vec{p} + \frac{g_\ell^2 g_s^2}{16m^3 c^4} \left( \vec{s} \wedge \vec{\nabla} V_{\text{Coul}} \right)^2. \quad (\text{C}_6.22)$$

L'énergie potentielle effective est

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{Coul}} + V_{\text{Amp}} + V_{\text{ten}}. \quad (\text{C}_6.23)$$

Nous voyons que le second terme de l'énergie potentielle ampérienne est négligeable par rapport au premier du fait des puissances de  $c$  qui interviennent ; de même l'énergie potentielle tenseur est négligeable. Ainsi l'énergie potentielle ampérienne est

$$V_{\text{Amp}} \approx \frac{g_\ell g_s}{4m^2 c^2} \left( \vec{s} \wedge \vec{\nabla} V_{\text{Coul}} \right) \cdot \vec{p}. \quad (\text{C}_6.24)$$

L'énergie cinétique effective diffère donc de l'énergie cinétique

$$T = \frac{(m\vec{v})^2}{2m} \neq T_{\text{eff}} = \frac{\vec{p}^2}{2m}. \quad (\text{C}_6.25)$$

Le hamiltonien de l'électron dans l'atome de protium est

$$H = T_{\text{eff}} + V_{\text{eff}} \approx \frac{\vec{p}^2}{2m} + V_{\text{Coul}} + \frac{g_\ell g_s}{4m^2 c^2} \left( \vec{\nabla} V_{\text{Coul}} \wedge \vec{p} \right) \cdot \vec{s}. \quad (\text{C}_6.26)$$

Nous passons maintenant à l'opérateur hamiltonien en utilisant les règles de quantification

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_{\text{Coul}} \hat{\mathbf{1}} + \frac{g\ell g_s}{4m^2 c^2} \left( \vec{\nabla} V_{\text{Coul}} \wedge \hat{\vec{p}} \right) \cdot \hat{\vec{s}}, \quad (\text{C}_6.27)$$

et avec la proposition 21 p. 233 sur la quantification

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (\text{C}_6.28)$$

d'où

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{Coul}} \hat{\mathbf{1}} - \frac{i\hbar g\ell g_s}{4m^2 c^2} \left( \vec{\nabla} V_{\text{Coul}} \wedge \vec{\nabla} \right) \cdot \hat{\vec{s}}. \quad (\text{C}_6.29)$$

Dans ce cas l'espace est euclidien. Par conséquent

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \quad \text{et} \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (\text{C}_6.30)$$

Nous avons montré que la mécanique quantique formulée dans les espaces de RIEMANN permet de retrouver l'équation de SCHRÖDINGER bien connue pour l'atome de protium.

## Bibliographie du chapitre 6

- [45] E. SCHRÖDINGER, « Mémoires sur la mécanique ondulatoire », Alcan, Paris, 1933.
- [46] E. SCHRÖDINGER, « Quantisierung als Eigenwertproblem », *Annalen der Physik*, Vol. 384, Publ. 6, pp. 489-527, 1926.
- [47] E. SCHRÖDINGER, « Quantisierung als Eigenwertproblem », *Annalen der Physik*, Vol. 386, Publ. 18, pp. 109-139, 1926.
- [48] F. MARTIN-ROBINE, « Histoire du principe de moindre action », Vuibert, Paris, 2006.
- [49] L. DE BROGLIE, « Éléments de théorie des quanta et de mécanique ondulatoire », Gauthier-Villars, Paris, 1953.
- [50] C. COHEN-TANNOUJJI, B. DIU & F. LALOË, « Mécanique quantique », Hermann, 1973.
- [51] J.-M. LÉVY-LEBLOND, « Position-dependent effective mass and Galilean invariance », *Physical Review A*, Vol. 52, Publ. 3, pp. 1845-1849, septembre 1995.
- [52] B. GÖNÜL, O. ÖZER, B. GÖNÜL & F. ÜZGÜN, « Exact Solutions of Effective-mass Schrödinger Equations », *Modern Physics Letters A*, Vol. 17, No. 37, 2453-2465, 2002.
- [53] L. LANDAU & E. LIFCHITZ, « Physique théorique, mécanique quantique », Mir, Moscou, 1982.



## Épilogue

LE LECTEUR de cette thèse reste probablement sur sa faim. À l'issue de ce travail, nous ne savons pas si les symétries de haut rang – c'est-à-dire les symétries géométriques du tétraèdre, du cube, de l'octaèdre, du dodécaèdre et de l'icosaèdre – existent réellement en physique nucléaire. Mais à vrai dire, nous n'avons pas essayé de répondre à une telle question. L'objectif de cette thèse était de construire des outils rigoureux de l'étude des symétries géométriques et de leur évolution.

Sur le plan théorique, nous pensons que cette partie du travail est arrivée à un degré convenable. La séparation adiabatique de mouvements nucléaires rapides et lents a permis de définir une collectivité nucléaire dans laquelle le champ moyen prend une place assez naturelle. Le concept de symétrie géométrique, *a priori* étrange pour un objet quantique comme le noyau, est possible du fait de son origine liée à la collectivité. Ce concept de symétrie possède immédiatement une dynamique venant du mouvement collectif. Il est, de ce fait, gouverné par une équation de SCHRÖDINGER, ce qui lui confère le statut d'objet quantique. En outre, il possède une inertie décrite avec le tenseur de masse qui intervient dans cette équation de SCHRÖDINGER. L'expression du tenseur de masse a pu être construite d'une manière explicite. Nous avons essayé, lors de la démonstration, de ne rien laisser dans l'ombre. Nous sommes parvenus à une expression renouvelée contenant un nouveau paramètre, la durée intermédiaire  $\tau$ , qui régule théoriquement le concept de collectivité à travers une fonction, la temporisatrice  $\aleph$ , introduite par nos soins.

Nous avons aussi explicité le cadre spatial du mouvement collectif, les espaces de RIEMANN, espaces non-euclidien dont la métrique est le tenseur de masse. Cela nous a permis d'aboutir à l'équation de SCHRÖDINGER collective, qui est à la racine du formalisme quantique du mouvement collectif.

Sur le plan de la réalisation numérique, les programmes de calcul du tenseur de masse, `WS_ODD`, et de résolution de l'équation de SCHRÖDINGER collective, `SE_COL`, sont écrits. Il reste à les éprouver, à les utiliser et à comprendre les résultats qu'ils nous donnent.

Au-delà de la perspective précédente, de concepts et d'outils de calculs solides et renforcés, nous sommes en mesure de répondre à un certain nombre de problématiques à titre d'applications de cette thèse.

Premièrement, nous abandonnons une vision statique du noyau, empreinte de physique clas-

---

†. « La connaissance, c'est cacher la connaissance. »

sique, où toute l'information est déduite d'un minimum d'énergie. Dans ce sens, le minimum de l'énergie potentielle ne correspond pas nécessairement au maximum de probabilité de présence. Cela nous permettra une généralisation des symétries expérimentales, du modèle collectif, du mouvement de point zéro (c'est-à-dire du noyau dans son état fondamental), des caractères approximatifs des symétries nucléaires.

Deuxièmement, nous allons éprouver l'existence du degré d'adiabaticité, à travers la durée intermédiaire  $\tau$  et la temporisatrice  $\aleph$ , en recalculant, à titre d'exemple et pour confirmation, les énergies d'excitation  $0_2^+$  dans les lanthanides.

Troisièmement, nous savons que la symétrie, dont nous traitons depuis quelques pages, est un modèle mathématique que nous plaquons sur la réalité nucléaire. La conséquence logique de ces symétries est l'apparition de règles d'interdictions dans les transitions électromagnétiques. Cependant, l'expérience montre que ces interdictions ne sont jamais absolues. Cela signifie que la réalité nucléaire n'a pas de symétrie exacte et parfaite. Alors, la détermination de la probabilité de présence d'un noyau dans l'espace collectif nous donnera accès à une valeur moyenne des déformations  $\langle \alpha_\lambda^\mu \rangle$  et à un écart quadratique moyen  $\Delta \alpha_\lambda^\mu$  qui désigneront la proportion de chaque symétrie.

Enfin quatrièmement, en incorporant tous les aspects de la rotation nucléaire, nous serons en mesure de reconstruire des spectres avec les intensités de transitions associées, afin de s'assurer de la bonne tenue du modèle, et surtout, afin de guider les expérimentateurs dans la préparation d'expériences pertinentes. Alors nous serons en mesure, en particulier, d'interpréter les états isomériques dont la demi-vie est supérieure à celle de l'état fondamental face à la fission du noyau.

Tout cela représente une étendue de physique extrêmement vaste et merveilleuse dans laquelle nous nous lançons avec joie.



«  $\sqrt{\text{vérité}} = \text{amour}$  »  
Andreï SAKHAROV

## Serment

LORS DE la cérémonie de remise du prix Nobel, Pierre CURIE conclut son discours par une ouverture sur l'éthique scientifique :

« On peut concevoir encore que dans des mains criminelles le radium puisse devenir très dangereux, et ici on peut se demander si l'humanité a avantage à connaître les secrets de la nature, si elle est mûre pour en profiter ou si cette connaissance ne lui sera pas nuisible. L'exemple des découvertes de NOBEL est caractéristique, les explosifs puissants ont permis aux hommes de faire des travaux admirables. Ils sont aussi un moyen terrible de destruction entre les mains des grands criminels qui entraînent les peuples vers la guerre. Je suis de ceux qui pensent, avec NOBEL, que l'humanité tirera plus de bien que de mal des découvertes nouvelles. »<sup>2</sup>

La question de la bonne utilisation des découvertes de la science s'est depuis reposée à maintes reprises et se pose encore aujourd'hui. La réponse n'est ni évidente, ni facile.

En mars 1938, le physicien Ettore MAJORANA laissa une lettre à sa mère dans laquelle il déclara que la physique n'est pas sur le bon chemin et qu'il est inquiet pour l'avenir de la science. A-t-il entrevu le destin de la physique ? Il décida d'étouffer sa voix et de disparaître.

En juillet 1938, la physicienne Lise MEITNER échappa aux griffes d'un régime politique totalitaire et meurtrier. Elle se réfugia en Suède et continua ses recherches en physique nucléaire. Elle donna en février 1939 la première explication théorique de la fission nucléaire. Lise MEITNER refusa de participer au projet Manhattan pour la mise au point de l'arme nucléaire. Elle dit qu'elle ne voulait pas avoir de rapport avec une bombe.

Il ne s'agit pas de juger les scientifiques qui prirent part au projet Manhattan, tel Richard FEYNMAN, ou ceux qui persistèrent à travailler sous le régime totalitaire de l'Allemagne des années 1930-1940, tel Werner HEISENBERG.

Comment aurais-je agi dans un tel contexte et comment auriez-vous réagi ?

L'histoire des hommes amène parfois des scientifiques à faire des choix terribles quant à la vie d'un grand nombre de leurs frères et que seule la théodicée de LEIBNIZ peut sauver. Cependant la décision d'Ettore MAJORANA et Lise MEITNER nous montre qu'une réflexion éthique concomitante aux recherches est possible.

---

2. Pierre CURIE, Discours Nobel, mardi 6 juin 1905.

« Nous ne devrions pas laisser croire que tout progrès scientifique peut être réduit à des mécanismes, des machines, des rouages, quand bien même de tels mécanismes ont eux aussi leur beauté. Je ne crois pas non plus que l'esprit d'aventure risque de disparaître dans notre monde. Si je vois quelque chose de vital autour de moi, c'est précisément cet esprit d'aventure, qui me paraît indéterminable et s'apparente à la curiosité. Sans la curiosité de l'esprit, que serions-nous ? Telle est bien la beauté et la noblesse de la science : désir sans fin de repousser les frontières du savoir, de traquer les secrets de la matière et de la vie sans idée préconçue des conséquences éventuelles. »<sup>3</sup>

Marie CURIE nous dit ici que la recherche ne peut s'effectuer qu'en toute liberté en dehors de toute conception utilitariste, de toute vision catastrophique. Henri BERGSON complète ceci en précisant quelle est la boussole qui indique la voie au chercheur et à l'homme.

« Les philosophes qui ont spéculé sur la signification de la vie et sur la destinée de l'homme n'ont pas assez remarqué que la nature a pris la peine de nous renseigner là-dessus elle-même. Elle nous avertit par un signe précis que notre destination est atteinte. Ce signe est la joie. Je dis la joie, je ne dis pas le plaisir. Le plaisir n'est qu'un artifice imaginé par la nature pour obtenir de l'être vivant la conservation de la vie ; il n'indique pas la direction où la vie est lancée. Mais la joie annonce toujours que la vie a réussi, qu'elle a gagné du terrain, qu'elle a remporté une victoire : toute grande joie a un accent triomphal. Or, si nous tenons compte de cette indication et si nous suivons cette nouvelle ligne de faits, nous trouvons que partout où il y a joie, il y a création : plus riche est la création, plus profonde est la joie. La mère qui regarde son enfant est joyeuse, parce qu'elle a conscience de l'avoir créé, physiquement et moralement. Le commerçant qui développe ses affaires, le chef d'usine qui voit prospérer son industrie, est-il joyeux en raison de l'argent qu'il gagne et de la notoriété qu'il acquiert ? Richesse et considération entrent évidemment pour beaucoup dans la satisfaction qu'il ressent, mais elles lui apportent des plaisirs plutôt que de la joie, et ce qu'il goûte de joie vraie est le sentiment d'avoir monté une entreprise qui marche, d'avoir appelé quelque chose à la vie. Prenez des joies exceptionnelles, celle de l'artiste qui a réalisé sa pensée, celle du savant qui a découvert ou inventé. Vous entendrez dire que ces hommes travaillent pour la gloire et qu'ils tirent leurs joies les plus vives de l'admiration qu'ils inspirent. Erreur profonde ! On tient à l'éloge et aux honneurs dans l'exacte mesure où l'on n'est pas sûr d'avoir réussi. »<sup>4</sup>

La boussole, c'est donc la joie, cette joie qui devrait assurer que le mal se dévore lui-même et que dans cette direction la recherche est orientée pour le bien. Mais laissons parler le poète qui entend tout cela plus élégamment.

---

3. Marie CURIE, Discours sur l'Avenir de la culture, 1933.

4. Henri BERGSON, « L'énergie spirituelle », Quadrige/PUF, Paris, 2009.

## Matière à rire<sup>5</sup>

Vous savez que j'ai un esprit scientifique.  
Or, récemment, j'ai fait une découverte bouleversante!  
En observant la matière de plus près...  
j'ai vu des atomes...  
qui jouaient entre eux...  
et qui se tordaient de rire!  
Ils s'esclaffaient!  
Vous vous rendez compte...  
des conséquences incalculables que cela peut avoir?  
Je n'ose pas trop en parler, parce que  
j'entends d'ici les savants!  
- Monsieur, le rire est le propre de l'homme!  
Eh oui! ...  
Et pourtant!  
Moi, j'ai vu, de mes yeux vu...  
des atomes qui : « Ha! ha! ha! »  
Maintenant, de qui riaient-ils?  
Peut-être de moi?  
Mais je n'en suis pas sûr!  
Il serait intéressant de le savoir.  
Parce que si l'on savait ce qui amuse les atomes,  
on leur fournirait matière à rire...  
Si bien qu'on ne les ferait plus éclater que de rire.  
Alors, me direz-vous, que deviendrait la fission nucléaire?  
Une explosion de joie!



Le philosophe Michel SERRES s'est posé la question :

« Comment l'éthique peut-elle intervenir avant toute recherche, mais sans entraver sa liberté? »

Il a proposé comme le fit HIPPOCRATE que tout scientifique puisse s'engager face à la responsabilité de ses recherches et qu'il prête serment ou non selon sa libre décision.

Prononcer ce serment ne garantit pas que les actes de celui qui s'est engagé ne seront jamais tournés contre des hommes. Prononcer ce serment ne protège pas des dilemmes. Mais cela lui permet de réfléchir à la portée de ses décisions. S'il est nécessaire d'enfreindre ce serment, cette infraction ne sera pas effectuée à la légère.

---

5. Raymond DEVOS, « Matière à rire », Olivier Orban, Paris, 1991.

Je décide de m'engager et de prêter ce serment dont voici une formulation possible :

« Pour ce qui dépend de moi, je jure de ne point faire servir mes connaissances, mes inventions et les applications que je pourrais tirer de celles-ci à la violence, à la destruction ou à la mort, à la croissance de la misère ou de l'ignorance, à l'asservissement ou à l'inégalité, mais de les dévouer, au contraire, à l'égalité entre les Hommes, à leur survie, à leur élévation et à leur liberté. »

Ce que je viens de promettre, je m'y engage, et que tu me viennes en aide.

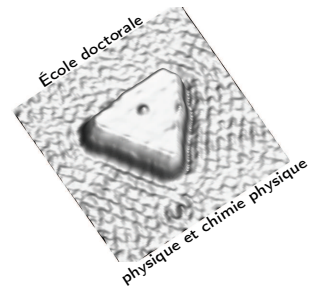
Johann-Sebastian BACH, BWV243

Si-cut erat in prin-ci - pi-o, si-cut erat in prin-  
ci - pi-o, in prin-ci-pi - o et nunc, nunc et sem-per et in  
sae - cu-la, et in sae-cu-la sae - cu - lo - - - - -  
- - - - - rum, A - men.



— **FIN** —





**David ROUVEL**

Essai sur les symétries géométriques et  
les transitions de forme du noyau de l'atome

Mots-clés : groupes ponctuels de symétrie, théorie du champ moyen nucléaire, tenseur de masse, approximation adiabatique, mouvement collectif.

Les symétries géométriques en usage en physique nucléaire sont assez peu variées, essentiellement la symétrie de l'ellipsoïde triaxial. On propose donc une méthode rigoureuse permettant d'étudier l'évolution et la possibilité de l'existence de symétries nouvelles dont la symétrie tétraédrique. Le formalisme de l'équation de SCHRÖDINGER est replacé dans le cadre des espaces de RIEMANN. Ce formalisme est utilisé dans le contexte du noyau de l'atome où l'on applique la théorie du champ moyen alliée à l'approximation adiabatique. Le noyau est le siège de deux catégories de mouvements adiabatiquement séparés, le mouvement rapide des nucléons dans le champ moyen, et le mouvement collectif modifiant lentement le champ moyen. Le second est régi par une équation de SCHRÖDINGER collective qui prend place dans un espace dont la métrique est donnée par le tenseur de masse. L'étude de la géométrie du noyau est alors calculable à l'aide de deux grands programmes développés dans le cadre de la thèse.

Studies of the Geometric Symmetries and  
the Shape Transitions in Atomic Nuclei

Keywords : symmetry point groups, nuclear mean-field theory, mass tensor, adiabatic approximation, collective motion.

The geometrical symmetries used in nuclear physics are not very diversified, essentially the symmetry of the triaxial ellipsoid. One proposes therefore a rigorous method allowing to study the temporal evolution and the possibility of the existence of new symmetries among them the tetrahedral symmetry. The formalism of SCHRÖDINGER equation is reformulated in the framework of RIEMANN's spaces. This formalism is used in the context of the atomic nucleus where one applies the mean-field theory combined with the adiabatic approximation. The nucleus is the terrain of two types of motions adiabatically separated, the quick motion of the nucleons in the mean-field and the collective motion modifying slowly the mean-field. The second one is governed by a collective SCHRÖDINGER equation written down in a space whose metric is given by the mass tensor. The study of the nucleus geometry is then computable with the help of two big programs developed within the thesis.