

Université Libre de Bruxelles

Faculté des Sciences appliquées

Méthode des réseaux de Lagrange en
mécanique quantique

Thèse présentée par Michel Hesse
en vue de l'obtention du grade
de Docteur en Sciences appliquées

Octobre 2001

Remerciements

Je tiens à remercier vivement le Professeur Daniel Baye pour m'avoir offert la possibilité d'effectuer une thèse de doctorat sous sa direction. Sa pédagogie et sa disponibilité, sans oublier l'étendue de ses connaissances scientifiques ont contribué au bon déroulement de ce travail. Je lui suis extrêmement reconnaissant pour tout cela, et également de m'avoir encouragé à présenter mon travail lors de conférences et séminaires.

Ce travail a été effectué au sein du service de Physique Nucléaire Théorique et Physique Mathématique de la faculté des sciences. Je remercie le Professeur Christiane Leclercq-Willain, chef de ce service, pour son accueil et les occasions qu'elle m'a données de participer à des écoles d'été et à une école doctorale.

Mes collègues, appartenant à ce même service, étaient de bon conseil en cas de difficultés. Je pense particulièrement aux bureaux du fond du couloir, dont les portes grandes ouvertes représentaient un phare pour le marin, parfois égaré en eaux troubles, que j'étais. Pierre Descouvemont m'a souvent aidé notamment en ce qui concerne les problèmes informatiques. J'ai eu avec Jean-Marc Sparenberg d'intéressantes discussions (de la physique à la métaphysique) en plus de collaborations fructueuses sur les problèmes de collision et sur les noyaux à halo. J'ai aussi eu l'occasion de collaborer avec Rachid Kamouni, également étudiant doctorant dans le service, sur le développement en portée effective. Je leur exprime ici toute ma gratitude.

Je suis également reconnaissant à Claude Semay et Bernard Silvestre-Bragg pour avoir initié une collaboration sur un sujet plus exotique que représentent les systèmes de quarks.

Au cours de ma thèse, des questions d'ordre numérique m'ont conduit chez Yvan Notay, spécialiste d'analyse numérique. J'ai ainsi pu tester une procédure de résolution numérique qu'il venait de développer. Je le remercie pour son aide, et également le Professeur Robert Beauwens pour m'avoir permis d'utiliser le super-ordinateur du service de métrologie nucléaire.

Enfin, je remercie Gregory Kozyreff pour son agréable compagnie durant les pauses déjeuner, ainsi que ma famille et mes amis pour leur soutien durant ces quatre années.

Cette thèse n'aurait pu se faire sans l'aide financière procurée par le Pôle d'attraction inter-universitaire du gouvernement belge pour la première année, et par le Fonds pour la formation à la recherche dans l'industrie et dans l'agriculture (FRIA) pour les trois années suivantes. Je remercie ces deux organismes pour leur financement.

Table des matières

1	Introduction	1
2	Réseaux et fonctions de Lagrange	5
2.1	Définitions	5
2.2	Méthode variationnelle et base de Lagrange	7
2.3	Construction du réseau et des fonctions de Lagrange	9
2.3.1	Méthode générale	9
2.3.2	Réseaux basés sur des polynômes orthogonaux	11
2.4	Extension de la famille des réseaux de Lagrange	14
2.5	Régularisation	15
2.6	Facteur d'échelle	17
2.7	Exemples de réseaux de Lagrange	18
2.7.1	Réseaux à pas constant et à pas exponentiel	19
2.7.2	Réseaux de Legendre et de Legendre translaté	23
2.7.3	Réseau de Laguerre	26
2.7.4	Réseau de gaussiennes	28
2.7.5	Réseaux régularisés	30
3	Méthodes de résolution sur réseau de l'équation de Schrödinger	33
3.1	Introduction	33
3.2	Méthodes locales	34
3.3	Méthodes globales	36
3.3.1	Méthodes DVR et des réseaux de Lagrange	37
3.3.2	Méthode du réseau de Fourier	43
3.3.3	Méthode DSC	45
3.4	Conclusions	46
4	Etats liés d'un système à deux corps	49
4.1	Introduction	49
4.2	Définition et solutions analytiques des potentiels	50
4.2.1	Potentiel de Morse	50
4.2.2	Potentiel d'oscillateur harmonique à trois dimensions	52
4.2.3	Potentiel coulombien	53
4.3	Calculs variationnels et sur réseaux de Lagrange	53
4.3.1	Energies d'états liés	55
4.3.2	Fonctions d'onde d'états liés	62

4.4	Méthodes sur réseaux	65
4.4.1	Energies d'états liés	65
4.4.2	Fonctions d'onde d'états liés	69
4.5	Systèmes à deux corps semi-relativistes	70
4.5.1	Calculs variationnel approché et sur réseau de Lagrange	71
4.5.2	Exemple : système de deux quarks	72
4.6	Conclusions	76
5	Collisions à une et plusieurs voies	79
5.1	Introduction	79
5.2	Matrice de collision et déphasages	80
5.3	Méthode de la matrice R	83
5.3.1	Etats liés	84
5.3.2	Matrice R à plusieurs voies	85
5.3.3	Développement en portée effective	86
5.4	Matrice R sur réseau de Lagrange	88
5.4.1	Hamiltonien sur base de Lagrange	88
5.4.2	Choix du réseau de Lagrange	89
5.5	Applications	91
5.5.1	Potentiel exponentiel	91
5.5.2	Potentiel de Yamaguchi	96
5.5.3	Collision nucléon-nucléon	98
5.6	Conclusions	108
6	Systèmes à trois corps - Généralités	109
6.1	Introduction	109
6.2	Systèmes de coordonnées	110
6.2.1	Coordonnées relatives	110
6.2.2	Coordonnées de Hylleraas normalisées	111
6.2.3	Coordonnées de Jacobi	112
6.2.4	Coordonnées périmétriques	113
6.3	Choix des réseaux de Lagrange	114
6.3.1	Coordonnées relatives	116
6.3.2	Coordonnées de Hylleraas normalisées	117
6.3.3	Coordonnées de Jacobi	118
6.3.4	Coordonnées périmétriques	119
6.4	Applications	120
6.4.1	Potentiels d'oscillateur harmonique	120
6.4.2	Potentiels gaussiens	123
6.4.3	Potentiels coulombiens	124
6.5	Conclusions	126
7	Systèmes à trois corps en physique nucléaire	127
7.1	Introduction	127
7.2	Modèle à trois corps	128
7.3	Fonctions de base et éléments de matrice	130
7.3.1	Méthode mixte	130

7.3.2	Méthode “tout réseau”	133
7.4	Applications	139
7.4.1	Comparaison des méthodes mixte et “tout réseau”	139
7.4.2	Calcul réaliste de l'état fondamental du noyau ${}^6\text{He}$	142
7.5	Conclusions	145
8	Systèmes à trois corps en physique atomique et moléculaire	147
8.1	Introduction	147
8.2	Hamiltonien pour un état de moment cinétique orbital total L	149
8.3	Fonctions d'onde et propriétés de symétrie	151
8.3.1	Etats S	152
8.3.2	Etats P	153
8.4	Choix des réseaux et bases de Lagrange	155
8.5	Calcul de valeurs moyennes d'observables	156
8.6	Applications	159
8.6.1	Energies d'états liés	159
8.6.2	Valeurs moyennes d'observables	165
8.7	Conclusions	169
9	Conclusions	171
A	Polynômes orthogonaux et règle de quadrature de Gauss	175
A.1	Polynômes orthogonaux	175
A.1.1	Zéros des polynômes	176
A.1.2	Polynômes orthogonaux classiques	177
A.1.3	Polynômes de Legendre	179
A.1.4	Polynômes de Laguerre ($\alpha = 0$)	179
A.2	Règle de quadrature de Gauss	180
A.2.1	Définition et propriétés	180
A.2.2	Estimation de l'erreur	182
B	Fonctions coulombiennes renormalisées à énergie nulle	187
C	Réseaux de Legendre et de Jacobi translats	189
C.1	Réseau de Legendre translats	189
C.2	Réseau de Jacobi (0,2) translats	189
D	Dérivées des fonctions de Lagrange aux points du réseau	191
D.1	Réseau de Laguerre	191
D.2	Réseau de Legendre	192
D.3	Réseau de Legendre translats	192
E	Méthodes mixte et “tout réseau” : opérateurs et éléments de matrice	193
E.1	Méthode mixte	193
E.2	Méthode “tout réseau”	198

F	Systèmes coulombiens à trois corps : opérateurs et éléments de matrice	203
F.1	Etats P pairs	203
F.2	Etats P impairs	203
F.2.1	Cas général	204
F.2.2	Systèmes atomiques à 3 corps dont deux sont identiques	206
F.2.3	Problème généralisé	208
	Bibliographie	210

Chapitre 1

Introduction

La résolution de l'équation de Schrödinger inhérente à l'étude des systèmes microscopiques non relativistes n'est possible analytiquement que pour un nombre limité de problèmes. Des méthodes fournissant des solutions approchées sont donc bien souvent requises. La plus utilisée depuis les débuts de la mécanique quantique est sans aucun doute la méthode variationnelle [CDL73, GO77], et en particulier la version dans laquelle la solution est approchée par un développement dans une base de fonctions choisies. Cette méthode requiert l'évaluation des éléments de matrice du hamiltonien décrivant le système étudié. Ce hamiltonien peut être décomposé en un terme cinétique et un terme potentiel représentant les différentes interactions entre les particules constituant le système physique, et avec d'éventuels champs extérieurs. La méthode variationnelle présente souvent l'avantage de fournir des résultats précis à l'aide d'une base contenant peu de fonctions, pour autant que ces dernières soient bien choisies, c'est-à-dire en accord avec les propriétés du système. L'inconvénient majeur de la méthode provient de la difficulté liée au calcul des éléments de matrice du potentiel, lorsque le potentiel et/ou les fonctions de base prennent une forme compliquée.

C'est pour cette raison que des méthodes d'approximation sur réseau, basées sur l'approche variationnelle, ont été développées. Les plus connues sont les méthodes de la variable discrétisée (DVR : discrete variable representation) [LHL85] et du réseau de Fourier [Kos88]. Ces méthodes reposent sur le choix d'une représentation, c'est-à-dire une base, caractérisée par un réseau de points. Dans cette base, la matrice du potentiel est approchée par une matrice diagonale simple, dont les éléments diagonaux correspondent au potentiel évalué aux points du réseau. Ceci constitue une approximation équivalente à l'emploi d'une règle de quadrature pour évaluer les éléments de matrice. Grâce à leur origine variationnelle, ces méthodes sur réseau fournissent une bonne précision, et en particulier meilleure que celle de calculs par différences finies.

La méthode des réseaux de Lagrange est également une méthode d'approximation sur réseau de ce type. Bien que pouvant être reliée à la méthode DVR (voir le chapitre 3), cette méthode a été introduite indépendamment par Baye et Heenen [BH86]. Leur but était d'expliquer les propriétés et notamment la précision de calculs avec un réseau de points uniformément répartis dans le cadre de problèmes Hartree-Fock en physique nucléaire. La grande différence

avec les méthodes sur réseau employées jusque là provient de l'utilisation explicite d'une base de fonctions, appelées fonctions de Lagrange, qui correspondent à des fonctions d'interpolation aux points du réseau. Les éléments de matrice du calcul variationnel dans cette base sont alors évalués en utilisant la règle de quadrature de Gauss associée au réseau de points considéré. Contrairement aux méthodes sur réseau traditionnelles, qui ne fournissent que les valeurs de la fonction d'onde aux points du réseau, la méthode des réseaux de Lagrange conduit à une approximation analytique de celle-ci, ce qui permet son évaluation en tout point du domaine. En plus d'un réseau à pas constant basé sur des fonctions trigonométriques, Baye et Heenen présentent dans leur article une technique pour construire des réseaux basés sur des polynômes orthogonaux et les fonctions de Lagrange associées. Ils appliquent leur nouvelle méthode à quelques problèmes simples de mécanique quantique tels que l'oscillateur harmonique, ainsi qu'à des problèmes Hartree-Fock nucléaires, pour lesquels ils obtiennent de très bons résultats. Par contre, dans le cas de l'atome d'hydrogène, la précision est fortement réduite à cause de la singularité à l'origine du potentiel coulombien, pour laquelle la quadrature de Gauss ne constitue pas une bonne approximation. L'intérêt de la méthode pour traiter des problèmes en physique atomique et moléculaire est ainsi limité [GLH89], à moins d'utiliser des techniques pour éliminer la singularité, comme par exemple en considérant le système de coordonnées semi-paraboliques qui rejette celle-ci à l'infini [BV91].

En 1993, Vincke, Malegat et Baye [VMB93] résolvent le problème des singularités de manière générale en développant une technique de régularisation des réseaux de Lagrange. Couplée à cette technique de régularisation, la méthode des réseaux de Lagrange a pu être appliquée avec succès à l'étude de systèmes atomiques à deux électrons [MV94] et de systèmes nucléaires à trois corps [BKV94, Bay97]. La méthode des réseaux de Lagrange ainsi développée se révèle à la fois très simple et très précise, ce qui la rend compétitive vis-à-vis d'autres méthodes de résolution.

L'objectif de ce travail est d'approfondir les différents aspects de la méthode des réseaux de Lagrange, et en particulier d'identifier ses avantages et inconvénients, ainsi que ses éventuelles limitations. Nous cherchons également à élargir son champ d'application en mécanique quantique.

Les systèmes à deux corps constituent une application simple qui permet d'analyser la précision de la méthode en ce qui concerne les énergies et les fonctions d'onde associées. Etudier un tel système est équivalent à déterminer le spectre correspondant au potentiel d'interaction entre les deux corps. Nous envisageons ainsi l'application de la méthode des réseaux de Lagrange au problème à deux corps afin de déterminer si ses propriétés la rendent compétitive vis-à-vis d'autres techniques telle que la méthode des différences finies. D'autre part nous examinons la possibilité d'étendre la méthode à la résolution d'équations régies par une dynamique différente de celle de l'équation de Schrödinger.

Notre ambition est également d'étudier les états liés de systèmes à trois corps. Ces problèmes, dont la résolution approchée peut s'avérer difficile, peuvent être traités par exemple à l'aide des méthodes de Faddeev ou des co-

ordonnées hypersphériques [Glö83, ZDF⁺93], qui sont précises mais lourdes. La méthode des réseaux de Lagrange pourrait se révéler compétitive pour ce type de problèmes grâce à sa simplicité de mise en œuvre.

Deux domaines d'application sont envisagés, la physique nucléaire et la physique atomique et moléculaire, qui diffèrent essentiellement par les interactions entre particules. En physique nucléaire, les interactions dépendent souvent du spin des nucléons constituant le noyau et des moments cinétiques orbitaux relatifs entre particules. Quant aux atomes et molécules, ils sont caractérisés en première approximation par des interactions purement coulombiennes. Ce dernier problème requiert une attention particulière lors d'un traitement sur réseau de Lagrange en raison des singularités à l'origine des potentiels coulombiens.

Le chapitre 2 contient une présentation détaillée de la méthode des réseaux de Lagrange. Le réseau et les fonctions de Lagrange y sont définis, et le lien avec la méthode variationnelle y est établi. Une méthode générale de construction de ceux-ci est développée, et est particularisée au cas important des réseaux de Lagrange basés sur des polynômes orthogonaux. La technique de régularisation, permettant l'élimination des singularités du potentiel, est également discutée.

Le chapitre 3 reprend une comparaison de différentes méthodes de résolution sur réseau d'équations de type Schrödinger. En particulier ce chapitre permet de situer la méthode des réseaux de Lagrange vis-à-vis d'autres méthodes couramment utilisées, telles que les méthodes DVR ou du réseau de Fourier.

Au chapitre 4 est présentée l'étude d'états liés de systèmes à deux corps, dont l'interaction est représentée par un potentiel ne dépendant que de la distance entre les deux corps. Une comparaison, qui porte sur les énergies des états liés et sur les fonctions d'onde correspondantes, est effectuée entre différents calculs sur réseaux de Lagrange et les calculs variationnels équivalents. Une généralisation relativiste de l'équation de Schrödinger, appelée équation de Salpeter sans spin, est aussi examinée.

Le chapitre 5 traite de collisions. Les déphasages, qui définissent la matrice de collision et caractérisent les états libres, sont déterminés en couplant les méthodes des réseaux de Lagrange et de la matrice R. Le cas particulier du développement en portée effective qui définit le comportement du déphasage aux basses énergies est également considéré.

Le chapitre 6 contient une analyse générale du traitement d'un problème à trois corps à l'aide de la méthode des réseaux de Lagrange. Quatre systèmes de coordonnées sont comparés lors de la détermination de l'énergie de l'état fondamental, en utilisant des potentiels d'oscillateur harmonique, gaussiens ou de type coulombien. Le cas du potentiel de type coulombien permet en particulier d'étudier le problème posé par des singularités dans ce type d'application.

Au chapitre 7 est présenté un modèle à trois corps du noyau à halo de neutrons ${}^6\text{He}$. Deux approches, les méthodes mixte et "tout réseau", qui diffèrent par le nombre de coordonnées auxquelles sont couplées des réseaux de Lagrange, sont utilisées pour étudier l'état fondamental de ce noyau. Ce problème permet une analyse du traitement de termes spin-orbite et tensoriel en

plus des termes centraux dans les potentiels d'interaction.

Le chapitre 8 est consacré à l'étude des états S et P de systèmes atomiques et moléculaires à trois corps sur réseaux de Lagrange. La méthode est appliquée en particulier à l'atome d'hélium, aux ions hydrogène et positronium, à l'ion moléculaire d'hydrogène et à la molécule muonique $d\mu$. Après avoir déterminé les énergies des états liés, les fonctions d'onde correspondantes sont utilisées pour calculer les valeurs moyennes de différentes observables tels que les rayons moyens.

Nos conclusions et perspectives sont présentées au chapitre 9

Chapitre 2

Réseaux et fonctions de Lagrange

2.1 Définitions

La méthode des réseaux de Lagrange est une méthode variationnelle approchée [BH86]. Cette méthode est basée sur l'existence d'une base de fonctions, dites fonctions de Lagrange, qui possèdent certaines propriétés vis-à-vis d'un réseau de points [Bay94]. Les fonctions de Lagrange ne doivent pas être confondues avec les polynômes d'interpolation de Lagrange [Pre75]. Ces derniers sont définis localement, c'est-à-dire uniquement sur une fraction du domaine de définition du problème étudié, alors que les fonctions de Lagrange, dont il est question ici, sont définies de manière globale sur tout le domaine et sont indéfiniment dérivables.

Un réseau de Lagrange est caractérisé par différents éléments. Comme tout réseau il est défini par un certain ensemble de points. Ce qui le particularise vis-à-vis des autres réseaux est qu'à chacun de ces points sont associés un poids constant et une fonction de Lagrange. L'ensemble des poids est tel qu'il définit avec l'ensemble des points du réseau une règle de quadrature de Gauss. Les fonctions de Lagrange associées servent quant à elles de fonctions de base à un calcul variationnel, et permettent de caractériser le réseau de Lagrange par une matrice correspondant à l'opérateur d'énergie cinétique. Nous allons maintenant examiner plus en détails ces différents points.

Considérons un réseau à une dimension formé des N points x_j appartenant à un intervalle (a, b) . Les fonctions de Lagrange associées à ce réseau sont des fonctions $f_i(x)$ orthonormées, indéfiniment dérivables sur cet intervalle, et qui vérifient avec les N points x_j du réseau les conditions suivantes

$$f_i(x_j) = \lambda_i^{-1/2} \delta_{ij}, \quad (2.1)$$

c'est-à-dire que la fonction de Lagrange f_i s'annule en tout point du réseau, sauf au point x_i qui lui est associé. Nous désignons ces conditions sous la dénomination de *conditions de Lagrange*.

Les points x_i et les poids λ_i définissent ensemble une règle de quadrature de Gauss [AS65, SS66]

$$\int_a^b g(x) dx \approx \sum_{i=1}^N \lambda_i g(x_i) \quad (2.2)$$

permettant d'approcher très simplement l'intégrale d'une fonction g par la somme des valeurs prises par cette fonction aux points du réseau pondérées par les poids λ_i , qui sont également appelés nombres de Christoffel.

Les propriétés principales des règles de quadrature de Gauss basées sur des polynômes orthogonaux sont rappelées à l'annexe A. Bien qu'il en existe d'autres, basées par exemple sur des fonctions trigonométriques, la plupart des formules de quadrature de la forme (2.2) utilisées dans ce travail sont basées sur des polynômes orthogonaux. Dans ce cas, les N points x_i sont les zéros du polynôme de degré N .

La caractéristique la plus importante est que la règle de quadrature (2.2) est exacte lorsque la fonction $g(x)$ est le produit de la fonction poids intervenant dans la relation d'orthogonalité des polynômes, et d'un polynôme de degré inférieur ou égal à $2N - 1$. Dans tous les autres cas la formule (2.2) ne fournit qu'une approximation de l'intégrale, dont une estimation de l'erreur peut être déterminée à l'aide de (A.70).

L'utilisation systématique de la règle de quadrature de Gauss (2.2) dans les calculs d'éléments de matrice est à l'origine de la grande simplicité de la méthode des réseaux de Lagrange.

A un réseau de Lagrange donné est habituellement associée une matrice correspondant à l'opérateur $-\frac{d^2}{dx^2}$ d'énergie cinétique calculé dans la base des fonctions de Lagrange. Cette matrice a donc pour éléments

$$T_{ij} = - \int_a^b dx f_i(x) f_j''(x). \quad (2.3)$$

Cette intégrale peut être évaluée de plusieurs façons. La plus simple, et celle généralement employée dans la méthode des réseaux de Lagrange, consiste à utiliser l'approximation de Gauss (2.2). Nous obtenons alors

$$T_{ij} \approx -\lambda_i^{1/2} f_j''(x_i), \quad (2.4)$$

et les éléments de matrice T_{ij} prennent une forme compacte simple. Pour certains réseaux de Lagrange la relation (2.4) se révèle exacte. Cependant, dans la plupart des cas la condition rendant la règle de quadrature de Gauss exacte n'est pas vérifiée, et la formule (2.4) ne constitue qu'une approximation de l'élément de matrice. Néanmoins nous utilisons toujours cette approximation, sauf dans les cas particuliers où elle se révèle très peu précise. Cela se produit par exemple lorsque la matrice cinétique ainsi construite n'est pas symétrique, ce qui n'est pas acceptable puisque l'opérateur cinétique est hermitique. Deux méthodes permettent de régler ce problème. La première solution consiste à rendre la matrice symétrique en remplaçant la formule (2.4) par

$$T_{ij} \approx -\frac{1}{2} \left(\lambda_i^{1/2} f_j''(x_i) + \lambda_j^{1/2} f_i''(x_j) \right), \quad (2.5)$$

qui fournit, comme (2.4), des expressions simples. La deuxième solution revient à symétriser la formule (2.3) en intégrant par parties

$$T_{ij} = - \int_a^b dx f_i(x) f_j''(x)$$

$$\begin{aligned}
&= - \left[f_i(x) f_j'(x) \right]_a^b + \int_a^b dx f_i'(x) f_j'(x) \\
&= \int_a^b dx f_i'(x) f_j'(x)
\end{aligned} \tag{2.6}$$

en supposant que les fonctions de base de Lagrange satisfont les conditions aux limites et s'annulent aux deux extrémités de l'intervalle (a, b) . Lorsque la règle de quadrature de Gauss ne fournit qu'une très mauvaise estimation des éléments T_{ij} , et qu'il n'existe pas d'expression analytique exacte pour ces éléments, il est nécessaire d'effectuer une intégration numérique. Dans ce cas également l'utilisation de la définition (2.6) nous garantit l'hermiticité de la matrice d'énergie cinétique.

Quelle que soit la manière dont ces éléments T_{ij} sont évalués, ils le sont une fois pour toutes dès que le réseau de Lagrange a été construit.

2.2 Méthode variationnelle et base de Lagrange

Les différents éléments intervenant dans la définition d'un réseau de Lagrange étant introduits, examinons ce qu'ils impliquent dans la mise en œuvre de la méthode des réseaux de Lagrange.

Pour mettre en évidence ses particularités, replaçons cette méthode dans le contexte général des méthodes variationnelles. Considérons un système physique caractérisé par un hamiltonien H défini par

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{2.7}$$

où $V(x)$ est un potentiel d'interaction. La résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire correspondante

$$H\Psi = E\Psi \tag{2.8}$$

nous fournit les énergies E définissant le spectre du système, ainsi que les fonctions d'ondes associées. A partir de celles-ci il est alors possible de déterminer différentes propriétés du système physique considéré, comme par exemple des probabilités de transition entre différents états d'énergie.

Les méthodes variationnelles de résolution [CDL73, GO77] consistent à approcher la fonction d'onde correspondant à un certain état du système à l'aide d'une fonction d'essai Φ dépendant de N paramètres c_i

$$\Phi = \Phi(c_1, \dots, c_N). \tag{2.9}$$

En général, une dépendance linéaire en ces paramètres est choisie pour la fonction d'essai Φ . Celle-ci prend alors la forme d'une combinaison linéaire de fonctions ϕ_i choisies en fonction du problème étudié

$$\Phi = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i. \tag{2.10}$$

Les paramètres variationnels c_i sont déterminés de manière à minimiser la fonctionnelle W définie par

$$W = \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}. \quad (2.11)$$

Ce choix des paramètres c_i assure la stationnarité de la fonctionnelle W au voisinage de la valeur E de l'énergie de l'état étudié. Dans le cas d'une fonction d'essai de la forme (2.10), la condition de stationnarité de la fonctionnelle W est équivalente au système d'équations suivant

$$\sum_{j=1}^N (H_{ij} - W N_{ij}) c_j = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (2.12)$$

où $H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle$ représente l'élément de matrice du hamiltonien pris entre les fonctions ϕ_i , et $N_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle$ est le produit scalaire des deux fonctions ϕ_i et ϕ_j . Le principe variationnel nous assure que W est toujours supérieur ou égal à l'énergie de l'état considéré, le cas de l'égalité ne se produisant que si la fonction d'essai est proportionnelle à la fonction d'onde recherchée.

La résolution de ce système d'équations nous fournit la valeur approchée W de l'énergie, ainsi que les coefficients c_j définissant l'approximation de la fonction d'onde correspondante. En décomposant le hamiltonien en la somme de l'énergie cinétique T et de l'énergie potentielle V , nous pouvons encore écrire

$$H_{ij} = \langle \phi_i | T + V | \phi_j \rangle = T_{ij} + V_{ij}. \quad (2.13)$$

La détermination de la matrice hamiltonienne d'éléments H_{ij} requiert donc le calcul des éléments de matrice du potentiel entre les fonctions ϕ_i choisies. L'évaluation de ces éléments de matrice peut s'avérer très ardue, et représenter la plus grande part du travail en termes de difficulté et de temps, selon les expressions du potentiel et des fonctions ϕ_i choisies.

Analysons maintenant le cas particulier de la méthode des réseaux de Lagrange. L'ensemble des fonctions ϕ_i correspond alors à une base de fonctions de Lagrange f_i . Dans ce travail, nous utilisons également la dénomination "base" pour désigner un ensemble fini de fonctions linéairement indépendantes. Dans le cas le plus courant des réseaux de Lagrange basés sur des polynômes orthogonaux, la base des fonctions de Lagrange est équivalente à une base complète tronquée. Ceci nous garantit la convergence des résultats lorsque nous augmentons la taille du réseau. L'équation de Schrödinger se ramène au système d'équations (2.12)

$$\sum_{j=1}^N (H_{ij} - W \delta_{ij}) c_j = 0 \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.14)$$

où $N_{ij} = \delta_{ij}$ puisque les fonctions de Lagrange sont orthonormées, et

$$H_{ij} = \langle f_i | H | f_j \rangle = T_{ij} + V_{ij}. \quad (2.15)$$

Les termes d'énergie potentielle sont dans ce cas évalués très simplement (sans calcul analytique) à l'aide de la règle de quadrature de Gauss associée au réseau

de Lagrange (2.2), et des conditions de Lagrange (2.1)

$$\begin{aligned}
V_{ij} &= \langle f_i | V | f_j \rangle \\
&= \int_a^b dx f_i(x) V(x) f_j(x) \\
&\approx \sum_{k=1}^N \lambda_k f_i(x_k) V(x_k) f_j(x_k) \\
&\approx V(x_i) \delta_{ij}
\end{aligned} \tag{2.16}$$

où x_i est le $i^{\text{ème}}$ point du réseau de Lagrange. La détermination des éléments de matrice V_{ij} ne nécessite donc que l'évaluation du potentiel aux points du réseau, la matrice potentielle résultante étant de plus purement diagonale. La matrice T_{ij} est également fort simple, et peut, dans certains cas, s'écrire sous une forme compacte, comme décrit précédemment. Finalement, le système d'équations (2.12) se réécrit

$$\sum_{j=1}^N (T_{ij} + V(x_i) \delta_{ij} - W \delta_{ij}) c_j = 0 \quad i = 1, \dots, N \tag{2.17}$$

et prend la forme simple d'équations sur réseau.

Dans la base des fonctions de Lagrange, la fonction d'onde approchée s'écrit

$$\Psi(x) \approx \sum_{i=1}^N c_i f_i(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i^{1/2} \Psi(x_i) f_i(x) \tag{2.18}$$

en vertu des conditions de Lagrange (2.1). Le coefficient c_i est donc directement relié à la valeur de la fonction d'onde au point x_i du réseau. Cependant la fonction d'onde peut être calculée en tout point du domaine à l'aide de la relation (2.18), et non pas uniquement aux points du réseau. Cette dernière propriété différencie la méthode des réseaux de Lagrange des méthodes sur réseau classiques.

2.3 Construction du réseau et des fonctions de Lagrange

Nous allons maintenant présenter une méthode générale de construction d'un réseau et des fonctions de Lagrange associées [Bay95]. Nous étudierons ensuite une méthode plus spécifique s'appliquant au cas important des réseaux basés sur des polynômes orthogonaux [BV99].

2.3.1 Méthode générale

Nous considérons un ensemble de N fonctions $\varphi_k(x)$ indéfiniment dérivables qui vérifient les conditions d'orthonormalité

$$\langle \varphi_k | \varphi_l \rangle = \int_a^b \varphi_k^*(x) \varphi_l(x) dx = \delta_{kl} \tag{2.19}$$

sur un intervalle (a, b) . L'éventuelle fonction poids intervenant dans le produit scalaire est introduite dans la définition des fonctions φ_k .

Dans l'intervalle (a, b) , N points x_i sont choisis, auxquels sont associés les N nombres

$$\lambda_i = \left[\sum_{k=1}^N |\varphi_k(x_i)|^2 \right]^{-1}. \quad (2.20)$$

Les points x_i et les poids λ_i définissent ensemble une règle de quadrature de Gauss (2.2)

$$\int_a^b g(x) dx \approx \sum_{i=1}^N \lambda_i g(x_i) \quad (2.21)$$

permettant d'approcher l'intégrale d'une fonction g sur l'intervalle (a, b) .

Nous introduisons ensuite une nouvelle base de N fonctions $f_i(x)$, qui prennent la forme de combinaisons linéaires des fonctions $\varphi_k(x)$

$$f_i(x) = \lambda_i^{1/2} \sum_{k=1}^N \varphi_k^*(x_i) \varphi_k(x). \quad (2.22)$$

Ces fonctions f_i sont appelées fonctions de Lagrange si elles satisfont les conditions de Lagrange (2.1)

$$f_i(x_j) = \lambda_i^{-1/2} \delta_{ij} \quad (2.23)$$

aux points x_j du réseau. Ces conditions entraînent l'orthonormalité des fonctions de Lagrange f_i

$$\langle f_i | f_j \rangle = \int_a^b f_i^*(x) f_j(x) dx = \delta_{ij} \quad (2.24)$$

sur l'intervalle (a, b) . En effet, les fonctions f_i définies par (2.22) satisfont les propriétés suivantes

$$\langle f_i | f_j \rangle = \lambda_j^{1/2} f_i^*(x_j) = \lambda_i^{1/2} f_j(x_i). \quad (2.25)$$

en vertu de (2.19). L'approximation (2.21) est alors exacte pour tout produit $f_i f_j$ (et également pour tout produit $\varphi_k \varphi_l$).

Pour $i \neq j$, les conditions de Lagrange et d'orthogonalité, appliquées à la définition (2.22) des fonctions f_i , impose $\frac{N(N-1)}{2}$ conditions sur le choix des N points x_i du réseau. Celles-ci, combinées avec (2.20) pour $i = j$, s'écrivent

$$\sum_{k=1}^N \varphi_k^*(x_i) \varphi_k(x_j) = \lambda_i^{-1} \delta_{ij}. \quad (2.26)$$

Lorsque $N \geq 4$, le nombre de conditions est plus grand que N . Ceci a pour conséquence qu'il n'existe pas nécessairement de réseau de Lagrange pour tout ensemble de fonctions φ_k . Cependant, la relation (2.26) est automatiquement satisfaite si l'approximation de Gauss (2.21) est exacte pour le produit scalaire $\langle \varphi_k | \varphi_l \rangle$. En effet, dans ce cas, nous avons

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i \varphi_k(x_i) \varphi_l(x_i) = \delta_{kl} \quad (2.27)$$

ce qui implique que la matrice d'éléments $\lambda_i^{1/2}\varphi_k(x_i)$ est unitaire, et (2.26) est satisfaite [DC68, LHL85]. Des fonctions de Lagrange existent donc toujours si une approximation de type Gauss est exacte pour $\langle \varphi_k | \varphi_l \rangle$.

Etant donné la relation (2.22) et l'unitarité de la matrice d'éléments $\lambda_i^{1/2}\varphi_k(x_i)$, la base des fonctions de Lagrange f_i est équivalente à la base des fonctions φ_k . Ceci induit que ces deux bases fournissent des résultats strictement identiques lorsqu'elles sont utilisées dans un calcul variationnel *exact*. L'avantage de la base de Lagrange est bien entendu de conduire à une matrice potentielle diagonale extrêmement simple, grâce à l'utilisation de l'approximation de Gauss et des conditions de Lagrange.

2.3.2 Réseaux basés sur des polynômes orthogonaux

La méthode de construction d'un réseau de Lagrange présentée dans cette section est un cas particulier de la méthode décrite précédemment, lorsque les fonctions φ_k sont des polynômes orthogonaux [BV99]. Cette technique de construction est intéressante car elle permet d'obtenir facilement des expressions compactes pour les fonctions de Lagrange, et par extension pour leurs dérivées. De plus, les réseaux basés sur les polynômes orthogonaux *classiques* constituent un cas très important, car ce sont les réseaux les plus couramment utilisés jusqu'à présent dans les applications.

Soit un intervalle (a, b) , avec a et b finis ou non, et une famille de polynômes $p_k(x)$ orthogonaux sur cet intervalle vis-à-vis de la fonction poids $w(x)$

$$\int_a^b w(x)p_k(x)p_l(x)dx = h_k\delta_{kl} \quad (2.28)$$

où h_k représente le carré de la norme du polynôme $p_k(x)$. Soient x_i les N zéros du polynôme de degré N

$$p_N(x_i) = 0. \quad (2.29)$$

Ces points fournissent avec les nombres de Christoffel λ_i la règle de quadrature de Gauss (2.21). D'après les propriétés exposées à l'annexe A, cette règle est en fait exacte lorsque la fonction $g(x)$ est le produit de la fonction poids $w(x)$ et d'un polynôme en x de degré inférieur ou égal à $2N - 1$. Les constantes λ_i peuvent être calculées à l'aide des relations (A.48) et (A.54)

$$[\lambda_i w(x_i)]^{-1} = \frac{k_{N-1} p'_N(x_i) p_{N-1}(x_i)}{h_{N-1} k_N} \quad (2.30)$$

où k_N est le coefficient du terme en x^N dans $p_N(x)$. Dans le cas des polynômes orthogonaux classiques, il existe une relation entre les polynômes p'_N et p_{N-1} en un point x_i du réseau, et (2.30) se simplifie, d'après (A.56), en

$$[\lambda_i w(x_i)]^{-1} = -\frac{k_{N-1} \sigma(x_i) [p'_N(x_i)]^2}{h_{N-1} k_N c_N a_N^{(1)}} \quad (2.31)$$

où la fonction $\sigma(x)$ et les coefficients c_N et $a_N^{(1)}$ sont définis à l'annexe A.

Les fonctions de Lagrange sont, quant à elles, définies par

$$f_i(x) = \left[\frac{w(x)}{\lambda_i w(x_i)} \right]^{1/2} \frac{p_N(x)}{(x - x_i) p'_N(x_i)}. \quad (2.32)$$

Ces fonctions, équivalentes à des combinaisons linéaires des fonctions $[w(x)]^{1/2} p_k(x)$, avec $k = 0, \dots, N - 1$, prennent donc la forme d'un produit d'un polynôme de degré $N - 1$ et de la racine carrée de la fonction poids $w(x)$. Il est facile de vérifier que ces fonctions $f_i(x)$ satisfont bien les conditions de Lagrange (2.23). De plus, elles sont orthonormées puisque l'approximation de Gauss sur (a, b) est exacte pour $w(x)$ multiplié par des polynômes en x de degré inférieur ou égal à $2N - 1$.

Comme nous l'avons vu précédemment, les éléments de matrice (2.3) de l'opérateur cinétique $-\frac{d^2}{dx^2}$ prennent une forme simple (2.4) lorsqu'ils sont évalués en utilisant la formule de quadrature de Gauss. Leur expression dépend alors de la dérivée seconde de la fonction de Lagrange $f_i(x)$ calculée au point du réseau x_j . Bien qu'il ne soit pas possible d'explicitier complètement ces expressions avant d'avoir déterminés les polynômes $p_k(x)$, nous allons néanmoins établir des formules pour les dérivées première et seconde des fonctions de Lagrange $f_i(x)$ aux points du réseau, en fonction des polynômes et de leurs dérivées en ces mêmes points. Afin d'alléger les notations, nous regroupons les différents termes constants de (2.32) dans la constante C_i , ce qui nous permet d'écrire

$$f_i(x) = C_i (w(x))^{1/2} \frac{p_N(x)}{x - x_i}, \quad (2.33)$$

$$C_i = [(\lambda_i w(x_i))^{1/2} p'_N(x_i)]^{-1}. \quad (2.34)$$

La dérivée première de la fonction $f_i(x)$ s'écrit alors avec la constante C_i

$$\begin{aligned} f'_i(x) &= C_i \frac{1}{2} (w(x))^{-1/2} w'(x) \frac{p_N(x)}{x - x_i} + C_i (w(x))^{1/2} \frac{p'_N(x)}{x - x_i} \\ &\quad - C_i (w(x))^{1/2} \frac{p_N(x)}{(x - x_i)^2}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

En un point x_j du réseau avec $j \neq i$, cette fonction se réduit à un seul terme puisque x_j est un zéro du polynôme $p_N(x)$, et nous obtenons

$$f'_i(x_j) = \lambda_i^{-1/2} \sqrt{\frac{w(x_j) p'_N(x_j)}{w(x_i) p'_N(x_i)}} \frac{1}{x_j - x_i}. \quad (2.36)$$

Pour évaluer la dérivée $f'_i(x)$ au point du réseau x_i qui lui est associé, il est nécessaire de passer à la limite pour x tendant vers x_i dans la formule (2.35) afin d'éviter les indéterminations du type $\frac{0}{0}$. En procédant ainsi l'expression (2.35) se réduit à

$$f'_i(x_i) = \frac{\lambda_i^{-1/2}}{2} \left[\frac{w'(x_i)}{w(x_i)} + \frac{p''_N(x_i)}{p'_N(x_i)} \right]. \quad (2.37)$$

La dérivation de (2.35) nous fournit l'expression suivante pour la dérivée seconde de $f_i(x)$

$$\begin{aligned}
f_i''(x) &= -\frac{C_i}{4} (w(x))^{-3/2} (w'(x))^2 \frac{p_N(x)}{x-x_i} + \frac{C_i}{2} (w(x))^{-1/2} w''(x) \frac{p_N(x)}{x-x_i} \\
&+ C_i (w(x))^{-1/2} w'(x) \frac{p'_N(x)}{x-x_i} - C_i (w(x))^{-1/2} w'(x) \frac{p_N(x)}{(x-x_i)^2} \\
&+ C_i (w(x))^{1/2} \frac{p''_N(x)}{x-x_i} - 2C_i (w(x))^{1/2} \frac{p'_N(x)}{(x-x_i)^2} \\
&+ 2C_i (w(x))^{1/2} \frac{p_N(x)}{(x-x_i)^3}. \tag{2.38}
\end{aligned}$$

En un point du réseau x_j , avec $j \neq i$, cette expression se limite aux trois termes suivants

$$f_i''(x_j) = \lambda_i^{-1/2} \sqrt{\frac{w(x_j) p'_N(x_j)}{w(x_i) p'_N(x_i)}} \frac{1}{x_j - x_i} \left[\frac{w'(x_j)}{w(x_j)} + \frac{p''_N(x_j)}{p'_N(x_j)} - \frac{2}{x_j - x_i} \right]. \tag{2.39}$$

Dans le cas du point x_i associé à la fonction $f_i(x)$, nous procédons comme pour la dérivée première en passant à la limite pour x tendant vers x_i . Ceci conduit à l'expression suivante pour $f_i''(x_i)$

$$\begin{aligned}
f_i''(x_i) &= -\frac{\lambda_i^{-1/2}}{4} \left(\frac{w'(x_i)}{w(x_i)} \right)^2 + \frac{\lambda_i^{-1/2}}{2} \frac{w''(x_i)}{w(x_i)} \\
&+ \frac{\lambda_i^{-1/2}}{2} \frac{w'(x_i) p''_N(x_i)}{w(x_i) p'_N(x_i)} + \frac{\lambda_i^{-1/2}}{3} \frac{p'''_N(x_i)}{p'_N(x_i)}. \tag{2.40}
\end{aligned}$$

Dès que la fonction poids $w(x)$ et les polynômes $p_N(x)$ sont choisis, les formules (2.39) et (2.40) permettent d'écrire les éléments de matrice (2.3) de l'opérateur cinétique calculés à l'approximation de Gauss sous une forme compacte (2.4).

Lorsque les polynômes $p_N(x)$ font partie de la famille des polynômes orthogonaux classiques, les relations (2.31) et (A.22) permettent des simplifications supplémentaires. Les expressions (2.36), (2.37), (2.39) et (2.40) deviennent respectivement

$$f_i'(x_j) = (-)^{i+j} \lambda_j^{-1/2} \sqrt{\frac{\sigma(x_i)}{\sigma(x_j)}} \frac{1}{x_j - x_i} \tag{2.41}$$

$$f_i'(x_i) = \frac{\lambda_i^{-1/2}}{2} \left[\frac{w'(x_i)}{w(x_i)} - \frac{\tau(x_i)}{\sigma(x_i)} \right] \tag{2.42}$$

$$f_i''(x_j) = (-)^{i+j} \lambda_j^{-1/2} \frac{1}{x_j - x_i} \sqrt{\frac{\sigma(x_i)}{\sigma(x_j)}} \left[\frac{w'(x_j)}{w(x_j)} - \frac{\tau(x_j)}{\sigma(x_j)} - \frac{2}{x_j - x_i} \right] \tag{2.43}$$

$$\begin{aligned}
f_i''(x_i) &= -\frac{\lambda_i^{-1/2}}{4} \left[\frac{w'(x_i)}{w(x_i)} \right]^2 + \frac{\lambda_i^{-1/2}}{2} \frac{w''(x_i)}{w(x_i)} - \frac{\lambda_i^{-1/2}}{2} \frac{w'(x_i) \tau(x_i)}{w(x_i) \sigma(x_i)} \\
&+ \frac{\lambda_i^{-1/2}}{3} \left[\frac{\tau(x_i)(\tau(x_i) + \sigma'(x_i))}{\sigma^2(x_i)} - \frac{\tau'(x_i) + d_N}{\sigma(x_i)} \right] \tag{2.44}
\end{aligned}$$

où n'apparaissent plus que les points x_i et les poids λ_i du réseau, ainsi que la fonction poids $w(x)$, et les fonctions $\sigma(x)$, $\tau(x)$ et d_N intervenant dans l'équation différentielle (A.22) définissant les polynômes orthogonaux classiques.

2.4 Extension de la famille des réseaux de Lagrange

Aux deux sections précédentes nous avons vu comment un réseau de Lagrange peut être construit à partir de fonctions orthogonales pour lesquelles il existe une règle de quadrature de Gauss. Nous présentons ici une technique pour agrandir la famille des réseaux de Lagrange, et qui permet a priori de créer une infinité de réseaux de Lagrange à partir de ceux existants.

Considérons un réseau de Lagrange constitué des N points u_i appartenant à un intervalle (c, d) . Ceux-ci et les poids associés $\tilde{\lambda}_i$ définissent une règle de quadrature de Gauss (2.21) sur (c, d)

$$\int_c^d g(u) du \approx \sum_{i=1}^N \tilde{\lambda}_i g(u_i). \quad (2.45)$$

Nous notons $\tilde{f}_i(u)$ les fonctions de Lagrange correspondantes qui vérifient les conditions de Lagrange aux points u_j du réseau

$$\tilde{f}_i(u_j) = \tilde{\lambda}_i^{-1/2} \delta_{ij}. \quad (2.46)$$

Nous introduisons maintenant une transformation bijective indéfiniment dérivable

$$u = t(x) \quad (2.47)$$

de (a, b) sur (c, d) . Cette transformation nous fournit un nouveau réseau de Lagrange dont les points x_i sont reliés aux points u_i par

$$x_i = t^{-1}(u_i). \quad (2.48)$$

Ces points définissent une règle de quadrature de Gauss sur (a, b)

$$\int_a^b g(t(x)) dx \approx \sum_{i=1}^N \lambda_i g(t(x_i)) \quad (2.49)$$

avec les poids λ_i qui sont donnés par

$$\lambda_i = \tilde{\lambda}_i [t'(x_i)]^{-1}. \quad (2.50)$$

Ceci s'obtient en comparant les formules (2.45) et (2.49) avec le changement de variable (2.47). Bien entendu les conditions sur la fonction $g(t(x))$ pour que l'approximation de Gauss (2.49) soit exacte ne sont pas les mêmes que celles sur $g(u)$ rendant l'approximation (2.45) exacte, à cause du facteur supplémentaire $t'(x)$ dans l'intégrant.

Les fonctions de Lagrange correspondant à ce nouveau réseau s'obtiennent à partir des fonctions de Lagrange $f_i(u)$ selon

$$f_i(x) = [t'(x)]^{1/2} \tilde{f}_i(t(x)) \quad (2.51)$$

où $t'(x)$ est la dérivée de la transformation $t(x)$. Il est facile de vérifier que ces fonctions $f_i(x)$ satisfont les conditions de Lagrange (2.23).

Les dérivées première et seconde de la fonction de Lagrange (2.51) peuvent s'écrire en fonction des dérivées de la transformation $t(x)$ et des fonctions de Lagrange initiales $\tilde{f}_i(u)$. Elles sont explicitement données par

$$f'_i(x) = \frac{1}{2} [t'(x)]^{-1/2} t''(x) \tilde{f}_i(t(x)) + [t'(x)]^{3/2} \tilde{f}'_i(t(x)), \quad (2.52)$$

$$\begin{aligned} f''_i(x) = & -\frac{1}{4} [t'(x)]^{-3/2} [t''(x)]^2 \tilde{f}_i(t(x)) + \frac{1}{2} [t'(x)]^{-1/2} t'''(x) \tilde{f}_i(t(x)) \\ & + 2 [t'(x)]^{1/2} t''(x) \tilde{f}'_i(t(x)) + [t'(x)]^{5/2} \tilde{f}''_i(t(x)), \end{aligned} \quad (2.53)$$

en utilisant la notation suivante pour les dérivées

$$\tilde{f}'_i(t(x)) = \left[\frac{d}{du} \tilde{f}_i(u) \right]_{u=t(x)}. \quad (2.54)$$

Les valeurs prises par les dérivées de $f_i(x)$ aux points x_j du réseau peuvent donc être déterminées à partir des valeurs des dérivées de $t(x)$ en ces mêmes points, ainsi que de celles des dérivées des fonctions de Lagrange initiales $\tilde{f}_i(u)$ aux points u_j .

Le choix de la transformation $u = t(x)$ étant libre, il est à priori possible de construire une infinité de nouveaux réseaux de Lagrange. Les formules (2.47) à (2.51) permettent théoriquement de créer des réseaux sur mesure, avec des propriétés spécifiques qui les rendent bien adaptés à l'étude d'un problème particulier.

Il est important de noter que l'approximation de Gauss n'est généralement pas exacte, ni même précise lors de l'évaluation des éléments de matrice T_{ij} (2.3). En effet, dans la plupart des cas, il n'est pas possible de mettre en évidence la racine carrée de la fonction poids dans $f''_j(x)$ (2.53). Ceci implique que, dans l'intégrale (2.3), n'apparaît pas la fonction poids $w(x)$ nécessaire à l'utilisation de la règle de quadrature de Gauss associée au réseau (A.45).

2.5 Régularisation

Dans certaines applications, le hamiltonien décrivant le système étudié présente des singularités. Les exemples les plus simples sont les termes centrifuges en $1/x^2$, ou encore les termes d'interaction coulombienne en $1/x$. Ces singularités peuvent poser problème. En effet, pour pouvoir utiliser une règle de quadrature de Gauss et ainsi obtenir une bonne estimation d'une intégrale, il

faut que l'intégrand contienne la fonction poids associée (A.45). L'erreur induite par cette approximation est alors bornée par un majorant d'une dérivée de la fonction à intégrer (A.70).

Nous supposons que les intégrales des termes contenant une singularité convergent. Cependant, du fait de la présence d'une singularité, l'intégrand n'a plus en général la forme d'un produit d'un polynôme avec la fonction poids correspondante. Rien ne garantit dans ce cas que la règle de quadrature de Gauss fournit de bons résultats lors de l'évaluation de l'intégrale, l'erreur sur la valeur de celle-ci pouvant alors être très grande. Ceci a pour conséquence de réduire considérablement, voire de détruire, la précision de la méthode des réseaux de Lagrange.

Pour résoudre ce type de problème, une technique de régularisation a été développée dans le cas de singularités concentrées en un point [VMB93]. Nous supposons que toutes les singularités sont localisées à l'origine des coordonnées, et nous nous limitons en particulier aux singularités en $1/x$ et $1/x^2$, qui sont les seules considérées dans ce travail. Nous définissons alors les fonctions de Lagrange régularisées par

$$f_i(x) = \frac{r(x)}{r(x_i)} \hat{f}_i(x) \quad (2.55)$$

où $\hat{f}_i(x)$ est la fonction de Lagrange initiale, telle que définie aux sections précédentes, et $r(x)$ est le facteur de régularisation. Ce facteur n'est évidemment pas quelconque puisqu'il est contraint par le comportement à l'origine de la fonction d'onde correspondant à l'état étudié. Le terme $r(x_i)$, représentant le facteur de régularisation calculé au point du réseau x_i , a pour rôle de préserver les conditions de Lagrange (2.23). Ces nouvelles fonctions ne sont pas orthonormées à cause du facteur $r^2(x)$ apparaissant dans l'intégrale du produit scalaire. Cependant elles restent orthonormées à l'approximation de Gauss

$$\int_a^b f_i(x) f_j(x) \approx \delta_{ij}, \quad (2.56)$$

c'est-à-dire que leur produit scalaire vaut bien δ_{ij} si nous évaluons l'intégrale à l'aide de la règle de quadrature de Gauss. Il est important de remarquer que si les fonctions de Lagrange (au sens large) ne sont exactement orthogonales que dans certains cas particuliers, elles sont, par construction, toujours orthonormées à l'approximation de Gauss.

Considérons le cas d'un terme centrifuge $\frac{l(l+1)}{x^2}$, où l est le moment cinétique orbital, qui est un entier positif ou nul, dans l'équation de Schrödinger radiale ($x \in [0, \infty[$)

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} + V(x) \right) \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (2.57)$$

où V est un potentiel suffisamment régulier (c'est-à-dire tel que $x^2V(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} 0$), Ψ la fonction d'onde et E son énergie. Dans la méthode des réseaux de Lagrange, la fonction d'onde Ψ est approchée par un développement sur la base des N fonctions de Lagrange (2.55)

$$\Psi(x) = \sum_{i=1}^N c_i f_i(x) \quad (2.58)$$

où les c_i sont des coefficients variationnels. La présence dans (2.57) du terme centrifuge lorsque l est différent de zéro, fait de l'origine $x = 0$ un point singulier régulier. Celui-ci impose donc le comportement à l'origine de la fonction d'onde [Mes59]

$$\Psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} x^{l+1}. \quad (2.59)$$

Ces considérations suggèrent le facteur de régularisation

$$r(x) = x^{l+1}, \quad (2.60)$$

permettant d'éliminer la singularité dans l'intégrale des éléments de matrice de $\frac{l(l+1)}{x^2}$ et de reproduire le bon comportement à l'origine de la fonction d'onde. Cependant, le choix (2.60) n'est pas le plus avantageux en pratique. Il induit en effet une dépendance en le moment cinétique orbital l des fonctions de base de Lagrange, ce qui complique leur utilisation dans des applications où des valeurs de l sont couplées (voir le chapitre 5). En fait la singularité du terme centrifuge est déjà éliminée en utilisant le facteur de régularisation

$$r(x) = x. \quad (2.61)$$

Bien entendu avec ce facteur les fonctions de base de Lagrange ne présentent plus le bon comportement à l'origine (2.59). Celui-ci devra donc être simulé par la combinaison (2.58) de ces fonctions. Les éléments de matrice du terme centrifuge dans la base des fonctions f_i (2.55) avec (2.61) valent

$$\begin{aligned} \int_a^b f_i(x) \frac{l(l+1)}{x^2} f_j(x) dx &= \frac{l(l+1)}{x_i x_j} \int_a^b \hat{f}_i(x) \hat{f}_j(x) dx \\ &= \frac{l(l+1)}{x_i^2} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (2.62)$$

en vertu de l'orthonormalité des fonctions de Lagrange initiales \hat{f}_i . Le choix (2.61) présente ainsi l'avantage que les éléments de matrice du terme centrifuge sont évalués exactement à l'approximation de Gauss. Ceci n'est pas vrai avec le choix (2.60) lorsque l est différent de zéro, l'approximation de Gauss à N points s'avérant de moins en moins précise lorsque l augmente, en raison de l'augmentation du degré polynomial du facteur de régularisation $r(x)$.

Cette technique de régularisation introduit dans l'intégrand des éléments de matrice un facteur supplémentaire de la forme d'une puissance de la variable d'intégration. La matrice d'énergie cinétique (2.3) n'est donc pas exactement équivalente à (2.4). De plus, pour la même raison, l'approximation de Gauss peut poser problème en ce qui concerne la précision et l'hermiticité des éléments T_{ij} . Il convient donc d'être prudent lors de la détermination de la matrice définissant l'énergie cinétique lorsque des fonctions de Lagrange régularisées sont utilisées.

2.6 Facteur d'échelle

Les sections précédentes décrivent comment les réseaux de Lagrange sont définis et construits. Lors de la mise en œuvre de la méthode des réseaux de

Lagrange pour traiter un problème physique, il est souvent utile d'introduire un facteur d'échelle h . Celui-ci a pour rôle d'adapter l'intervalle (a, b) de définition des points du réseau au problème considéré. Les points du réseau sont alors répartis dans l'intervalle (ha, hb) . L'introduction de ce facteur d'échelle est équivalente à la transformation $u = t(x) = hx$, et les développements effectués à la section 2.4 sont également d'application dans cette section. La fonction d'onde $\Psi(x)$ décrivant l'état du système s'écrit en fonction des N fonctions de Lagrange f_i selon

$$\Psi(x) = \sum_{j=1}^N c_j f_j(x/h). \quad (2.63)$$

A titre d'exemple, dans le cas de l'équation de Schrödinger (2.8), les équations sur réseau (2.17) se réécrivent, après l'introduction du facteur d'échelle h sous la forme

$$\sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{h^2} T_{ij} + V(hx_i) \delta_{ij} - W \delta_{ij} \right) c_j = 0 \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.64)$$

Dans ces équations intervient maintenant le potentiel évalué aux points hx_i , où x_i est un point du réseau de Lagrange. Le facteur d'échelle h doit donc être choisi de sorte que le potentiel $V(x)$ soit bien représenté par sa discrétisation aux points hx_i .

Le facteur h peut aussi être vu comme un paramètre variationnel dans la méthode. Cependant, en pratique, les résultats sont peu sensibles à la valeur précise de h . En effet, la dépendance de ceux-ci en fonction de h présente un plateau plus ou moins étendu selon la valeur du nombre N de points du réseau.

La première étape lors de l'étude d'une application consiste à analyser les résultats lors d'une variation du facteur d'échelle h , en effectuant des calculs avec un réseau de Lagrange contenant peu de points. De cette analyse est ensuite extrait un "bon" facteur h , c'est-à-dire une valeur correspondant au plateau. Cette valeur est alors utilisée dans des calculs faisant intervenir des réseaux de Lagrange à plus grand nombre de points.

Le facteur d'échelle peut également servir à tester la précision des résultats, à partir d'une étude de la stabilité de ceux-ci vis-à-vis de petites variations de la valeur de h .

2.7 Exemples de réseaux de Lagrange

Dans cette section, nous présentons quelques réseaux de Lagrange, que nous utiliserons lors de l'étude de différentes applications aux chapitres suivants. Les fonctions de Lagrange sont données sous une forme explicite compacte, et leurs dérivées première et seconde, intervenant dans le calcul des éléments de matrice des termes d'énergie cinétique sont également introduites. Les valeurs particulières prises par ces fonctions aux points du réseau sont précisées. L'opérateur d'énergie cinétique étant souvent lié à l'opérateur dérivée seconde, nous présentons les éléments de matrice de cet opérateur entre fonctions de Lagrange, sous une forme explicite compacte lorsque c'est possible.

2.7.1 Réseaux à pas constant et à pas exponentiel

Le réseau le plus simple pouvant être construit sur un intervalle fini est le réseau à pas constant, dans lequel tous les points sont équidistants. Nous pouvons associer à ce réseau des fonctions sinusoïdales. Plusieurs ensembles de fonctions sont possibles selon les conditions aux limites choisies [Bay95]. A titre d'exemple nous présentons le réseau de Lagrange basé sur des fonctions sinus définies sur l'intervalle $[0, 1]$. Nous considérons donc l'ensemble formé par les fonctions orthonormées suivantes

$$\varphi_k(x) = \sqrt{2} \sin(\pi k x). \quad (2.65)$$

Les fonctions de Lagrange sont alors données par (2.22)

$$f_i(x) = 2\lambda_i^{1/2} \sum_{k=1}^N \sin(\pi k x_i) \sin(\pi k x) \quad (2.66)$$

$$= \lambda_i^{1/2} \left(\sum_{k=1}^N \cos(\pi k(x - x_i)) - \sum_{k=1}^N \cos(\pi k(x + x_i)) \right) \quad (2.67)$$

en utilisant les relations trigonométriques. La relation de sommation

$$\sum_{k=1}^N \cos(k a + b) = \cos\left(\frac{N+1}{2}a + b\right) \frac{\sin \frac{N}{2}a}{\sin \frac{a}{2}} \quad (2.68)$$

nous permet d'écrire

$$\sum_{k=1}^N \cos(k\pi x) = \cos\left(\frac{N+1}{2}\pi x\right) \frac{\sin \frac{N}{2}\pi x}{\sin \frac{\pi x}{2}} \quad (2.69)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\sin[(2N+1)\frac{\pi}{2}x]}{\sin \frac{\pi}{2}x} - \frac{1}{2}. \quad (2.70)$$

Les N fonctions de Lagrange prennent alors la forme explicite suivante

$$f_i(x) = \frac{\lambda_i^{1/2}}{2} \left[\frac{\sin[(2N+1)\frac{\pi}{2}(x - x_i)]}{\sin \frac{\pi}{2}(x - x_i)} - \frac{\sin[(2N+1)\frac{\pi}{2}(x + x_i)]}{\sin \frac{\pi}{2}(x + x_i)} \right]. \quad (2.71)$$

Les points x_i du réseau sont déterminés à l'aide des relations (2.26), qui s'écrivent

$$\frac{1}{2} \left[\frac{\sin[(2N+1)\frac{\pi}{2}(x_i - x_j)]}{\sin \frac{\pi}{2}(x_i - x_j)} - \frac{\sin[(2N+1)\frac{\pi}{2}(x_i + x_j)]}{\sin \frac{\pi}{2}(x_i + x_j)} \right] = 0 \quad (2.72)$$

pour $i \neq j$. Ces expressions s'annulent lorsque les deux numérateurs sont simultanément nuls. Si nous rejetons les solutions pour lesquelles 0 ou 1 est un point du réseau, deux réseaux de points x_i avec un espacement constant $2/(2N+1)$ sont obtenus, tels que

$$x_i = \frac{2i-1}{2N+1} \quad (2.73)$$

et

$$x_i = \frac{2i}{2N+1}. \quad (2.74)$$

Ces réseaux sont mutuellement symétriques par rapport au centre de l'intervalle. Les poids λ_i sont quant à eux calculés avec (2.20), et valent

$$\lambda_i = \frac{2}{2N+1}. \quad (2.75)$$

L'expression (2.72) s'annule également lorsque les deux termes prennent la même valeur 1 ou -1 . A nouveau, si nous excluons les solutions faisant intervenir 0 ou 1 comme point du réseau, nous obtenons un troisième réseau avec un pas de $1/(N+1)$ défini par

$$x_i = \frac{i}{N+1}. \quad (2.76)$$

Ce réseau est symétrique par rapport à $x = \frac{1}{2}$. D'après (2.20), les poids correspondants sont

$$\lambda_i = \frac{1}{N+1}. \quad (2.77)$$

Sur la figure 2.1 sont représentées les fonctions de Lagrange (2.71) associées au réseau défini par (2.76), avec $N = 4$. Les quatre points du réseau sont indiqués par des croix. Nous constatons que les fonctions de Lagrange vérifient bien les conditions de Lagrange (2.23) puisqu'elles s'annulent en tout point du réseau sauf un. Les fonctions de Lagrange s'annulent également aux deux extrémités de l'intervalle $[0, 1]$ car elles sont basées sur les fonctions sinusoidales (2.65) qui vérifient ces conditions aux limites.

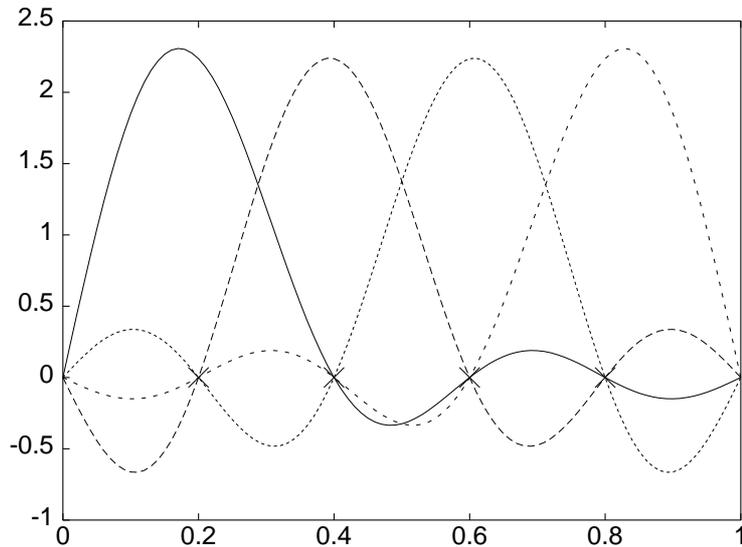


FIG. 2.1 – Fonctions de Lagrange associées à un réseau à pas constant de $N = 4$ points. La position des points du réseau est indiquée par des croix.

Déterminons maintenant la matrice d'énergie cinétique d'éléments T_{ij} (2.3) associée à ce réseau de Lagrange. Ces éléments de matrice sont dans ce cas-ci

donnés par

$$T_{ij} = - \int_0^1 dx f_i(x) f_j''(x). \quad (2.78)$$

Les fonctions de Lagrange f_j étant équivalentes à une combinaison linéaire de fonctions sinus (2.66), leur dérivée seconde s'exprime sous une forme semblable. La règle de quadrature de Gauss associée au réseau étant exacte pour tout produit de fonctions sinus, les éléments T_{ij} sont exactement donnés par (2.4),

$$T_{ij} = -\lambda_i^{1/2} f_j''(x_i). \quad (2.79)$$

Nous pouvons donc les évaluer simplement en calculant les valeurs prises par la dérivée seconde de la fonction de Lagrange f_j aux points x_i du réseau. En posant

$$\Phi(x, \beta) = \frac{\sin \left[(2N+1) \frac{\pi}{2} (x + \beta) \right]}{\sin \left[\frac{\pi}{2} (x + \beta) \right]} \quad (2.80)$$

nous pouvons réécrire (2.79) sous la forme

$$T_{ij} = -\frac{\lambda_i}{2} (\Phi''(x_i, -x_j) - \Phi''(x_i, x_j)). \quad (2.81)$$

En dérivant deux fois (2.80) et en utilisant les formules trigonométriques, nous obtenons

$$\begin{aligned} \Phi''(x, \beta) &= - \left[(2N+1)^2 + 1 \right] \frac{\pi^2}{4} \Phi(x, \beta) - \frac{\pi^2 \cos [(N+1)\pi(x+\beta)]}{2 \sin^2 \left[\frac{\pi}{2} (x + \beta) \right]} \\ &\quad - (2N+1) \frac{\pi^2 \cos [(N+1)\pi(x+\beta)] \cos^2 \left[\frac{\pi}{2} (x + \beta) \right]}{2 \sin^2 \left[\frac{\pi}{2} (x + \beta) \right]} \\ &\quad - (2N+1) \frac{\pi^2 \sin [(N+1)\pi(x+\beta)] \cos \left[\frac{\pi}{2} (x + \beta) \right]}{2 \sin \left[\frac{\pi}{2} (x + \beta) \right]} \\ &\quad + \frac{\pi^2 \sin [(N+1)\pi(x+\beta)] \cos \left[\frac{\pi}{2} (x + \beta) \right]}{2 \sin^3 \left[\frac{\pi}{2} (x + \beta) \right]}. \end{aligned} \quad (2.82)$$

Pour pouvoir expliciter d'avantage cette expression, nous devons spécifier le réseau choisi parmi les trois réseaux possibles (2.73, 2.74 et 2.76). A titre d'exemple, nous optons pour le troisième réseau (2.76). Les expressions explicites présentées dans la suite ne seront donc valables que pour ce réseau particulier. Puisque $\beta = \pm x_j$, et en vertu de (2.76), nous avons

$$\sin [(N+1)\pi(x_i \pm x_j)] = 0, \quad (2.83)$$

$$\cos [(N+1)\pi(x_i \pm x_j)] = (-)^{i+j}. \quad (2.84)$$

Lorsque $i \neq j$, la fonction Φ évaluée en x_i se réduit à

$$\Phi(x_i, \pm x_j) = (-)^{i+j+1}, \quad (2.85)$$

et nous obtenons alors l'expression suivante pour la dérivée seconde de Φ au point x_i

$$\Phi''(x_i, \pm x_j) = (-)^{i+j} (N+1)^2 \pi^2 - (N+1) \pi^2 \frac{(-)^{i+j}}{\sin^2 \left[\frac{\pi}{2} (x_i \pm x_j) \right]}. \quad (2.86)$$

Etant donnée la relation (2.77) entre le poids λ_i et le nombre de points N , l'élément de matrice T_{ij} avec $i \neq j$ est donné par l'expression

$$T_{ij} = (-)^{i+j} \frac{\pi^2}{2} \left[\frac{1}{\sin^2 \left[\frac{\pi}{2} (x_i - x_j) \right]} - \frac{1}{\sin^2 \left[\frac{\pi}{2} (x_i + x_j) \right]} \right]. \quad (2.87)$$

Lorsque $i = j$, la fonction $\Phi''(x, \beta)$ doit être évalué différemment selon la valeur de β . Si β vaut x_i , la dérivée seconde est à nouveau donnée par (2.86). Par contre lorsque β est égal à $-x_i$, l'évaluation de $\Phi(x_i, -x_i)$ nécessite le passage à la limite pour x tendant vers x_i dans (2.82) afin de lever les indéterminations dues aux dénominateurs qui s'annulent. En procédant ainsi nous obtenons

$$\Phi(x_i, -x_i) = -\frac{\pi^2}{3} N(N+1)(2N+1), \quad (2.88)$$

ce qui nous fournit l'élément T_{ii}

$$T_{ii} = \frac{\pi^2}{2} \left[\frac{2}{3} (N+1)^2 + \frac{1}{3} - \frac{1}{\sin^2(\pi x_i)} \right]. \quad (2.89)$$

A partir du réseau à pas constant (2.76), il est possible de construire de nouveaux réseaux par la technique décrite à la section 2.4. Le réseau à pas exponentiel est ainsi construit en effectuant sur le réseau (2.76) la transformation

$$u = t(x) = \frac{1}{\alpha} \ln [1 + (e^\alpha - 1)x] \quad (2.90)$$

qui applique l'intervalle $[0, 1]$ sur lui-même, et où α est un paramètre. Cette transformation est utilisée par exemple dans les méthodes de discrétisation de l'équation de Schrödinger dépendante du temps [Mel97]. Les points de ce nouveau réseau sont définis par

$$x_i = \frac{e^{\alpha u_i} - 1}{e^\alpha - 1} \quad (2.91)$$

où u_i est un point du réseau à pas constant (2.76). La répartition des points x_i sur $[0, 1]$ est tel que représenté sur la figure 2.7.1, et présente un espacement qui augmente exponentiellement. La concentration des points près de l'origine est importante. Par contre peu de points (voire aucun selon la valeur de α) sont situés à proximité de l'extrémité $x = 1$ de l'intervalle de définition du réseau.

Les fonctions de Lagrange associées aux points x_i sont déterminées en combinant les relations (2.51) et (2.71). Ces fonctions sont représentées à la figure 2.7.1 dans le cas d'un réseau de $N = 4$ points, et pour un paramètre α égal

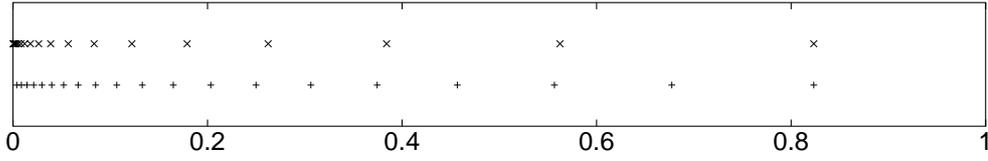


FIG. 2.2 – Distribution des points du réseau à pas exponentiel avec $N=20$ points. Le paramètre α vaut 4 pour les + et 8 pour les \times . La répartition des points correspondant à $\alpha = 8$ a été dilatée d'un facteur 1.2 de sorte que la position du dernier point soit la même pour les deux réseaux.

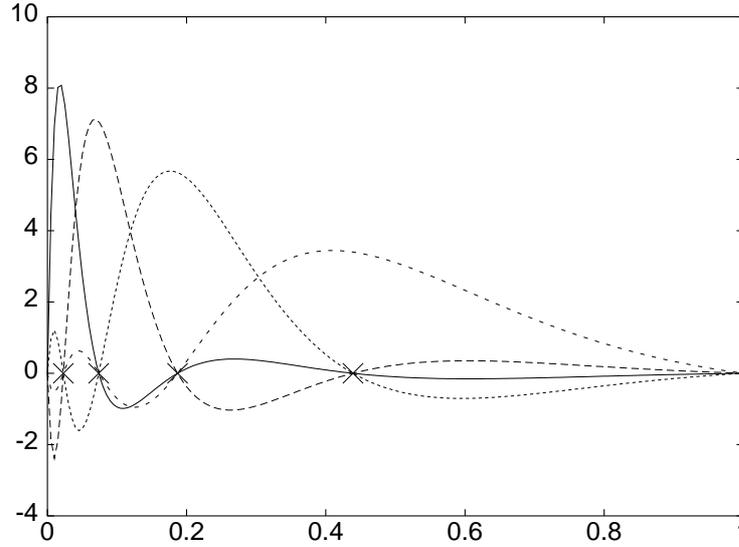


FIG. 2.3 – Fonctions de Lagrange pour le réseau à pas exponentiel. Les 4 points du réseau sont indiqués par des \times , et le paramètre α vaut 4.

à 4. Comme les fonctions de Lagrange du réseau à pas constant, ces fonctions s'annulent aux deux extrémités de l'intervalle $[0, 1]$.

Contrairement au cas du réseau à pas constant, l'approximation de Gauss n'est pas exacte lors de l'évaluation des éléments de matrice T_{ij} de l'énergie cinétique. Nous pouvons néanmoins les calculer analytiquement, et les écrire sous la forme

$$T_{ij} = (\tilde{\lambda}_i \tilde{\lambda}_j)^{1/2} \sum_{k,l=1}^N \sin(\pi k u_i) \sin(\pi l u_j) \tilde{T}_{kl} \quad (2.92)$$

où $\tilde{\lambda}_i$ est le poids défini par (2.77), et

$$\tilde{T}_{kl} = 4\pi^2 \frac{(e^\alpha - 1)^2}{\alpha} \left(1 - (-)^{k+l} e^{-2\alpha}\right) kl \frac{5\alpha^2 + 2\pi^2(k^2 + l^2)}{[4\alpha^2 + \pi^2(k-l)^2][4\alpha^2 + \pi^2(k+l)^2]}. \quad (2.93)$$

2.7.2 Réseaux de Legendre et de Legendre translaté

Le réseau de Legendre est basé sur les polynômes de Legendre, qui sont un cas particulier des polynômes de Jacobi et qui appartiennent à la famille

des polynômes orthogonaux classiques (Annexe A). Nous allons donc suivre la procédure de construction décrite à la section 2.3.2. Comme pour tous les réseaux basés sur des polynômes orthogonaux, les points du réseau sont définis par les zéros du polynôme en question. Dans ce cas-ci, les points x_i du réseau de Lagrange-Legendre correspondent aux N zéros du polynôme de Legendre de degré N

$$P_N(x_i) = 0 \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.94)$$

La distribution de ces N points dans l'intervalle $[-1, 1]$ est représentée à la figure 2.4. Ces points sont fortement concentrés autour des extrémités -1

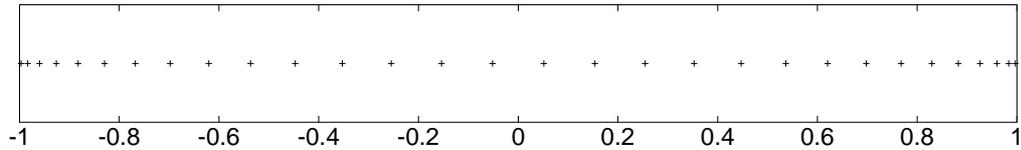


FIG. 2.4 – Distribution des points d'un réseau de Lagrange-Legendre, avec $N=30$

et 1 de l'intervalle, et se répartissent symétriquement par rapport à l'origine $x = 0$. Il faut également remarquer que l'origine fait partie des points du réseau lorsque N est impair. Les poids λ_i associés aux points x_i du réseau peuvent être déterminées à l'aide de la relation (2.31)

$$\lambda_i^{-1} = \frac{1 - x_i^2}{2} [P'_N(x_i)]^2 \quad (2.95)$$

en utilisant les valeurs données dans l'annexe A pour les différents facteurs apparaissant dans (2.31). D'après (2.32), les fonctions de Lagrange basées sur les polynômes de Legendre s'écrivent sous la forme suivante

$$f_i(x) = \lambda_i^{-1/2} \frac{P_N(x)}{P'_N(x_i)(x - x_i)} \quad (2.96)$$

ou encore, en tirant $P'_N(x_i)$ de (2.95),

$$f_i(x) = (-)^{i+N} \sqrt{\frac{1 - x_i^2}{2}} \frac{P_N(x)}{x - x_i} \quad (2.97)$$

où le facteur de phase $(-)^{i+N}$ découle de (2.95), car λ_i est toujours positif.

Les fonctions de Lagrange $f_i(x)$ (2.97) sont tracées sur la figure 2.5. Elles correspondent à un réseau de $N = 4$ points, dont la position est indiquée par des croix. Les 2 fonctions de Lagrange associées aux points x_i et $-x_i$ sont mutuellement symétriques par rapport à l'origine. Ceci peut se voir sur la définition des fonctions $f_i(x)$ (2.97) car les polynômes de Legendre ont une parité bien définie.

Nous allons maintenant déterminer les expressions des dérivées première et seconde des fonctions de Lagrange-Legendre calculées aux points du réseau. En

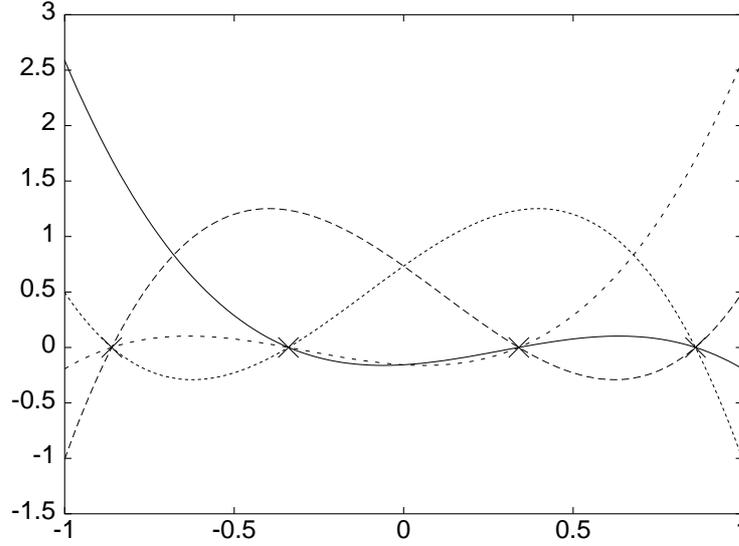


FIG. 2.5 – Fonctions de Lagrange-Legendre associées à un réseau de $N = 4$ points. Les points du réseau sont représentés par des croix.

particularisant les relations (2.41) à (2.44) au cas des polynômes de Legendre, nous obtenons

$$f'_i(x_j) = \lambda_j^{-1/2} \frac{(-)^{i+j}}{x_j - x_i} \sqrt{\frac{1 - x_i^2}{1 - x_j^2}}, \quad (2.98)$$

$$f'_i(x_i) = \lambda_i^{-1/2} \frac{x_i}{1 - x_i^2} \quad (2.99)$$

pour la dérivée première, et

$$f''_i(x_j) = 2(-)^{i+j} \lambda_j^{-1/2} \frac{2x_j^2 - x_i x_j - 1}{(1 - x_j^2)(x_j - x_i)^2} \sqrt{\frac{1 - x_i^2}{1 - x_j^2}}, \quad (2.100)$$

$$f''_i(x_i) = \frac{\lambda_i^{-1/2}}{3(1 - x_i^2)} \left[\frac{8}{1 - x_i^2} - (N^2 + N + 6) \right] \quad (2.101)$$

pour la dérivée seconde.

Examinons maintenant les éléments de matrice (2.3) de l'énergie cinétique entre fonctions de Lagrange-Legendre. Etant donné que la fonction poids $w(x)$ est une constante, la dérivée seconde de la fonction de Lagrange $f_i(x)$ a la forme d'un polynôme en x de degré $N - 3$. La règle de quadrature (2.21) permet donc d'évaluer exactement les éléments T_{ij} à l'aide de (2.4) avec $f''_j(x_i)$ qui est donnée par (2.100) et (2.101).

Le réseau de Legendre translaté est obtenu en effectuant une translation sur les polynômes de Legendre, de manière à ramener l'intervalle $[-1, 1]$ sur $[0, 1]$. Ce nouveau réseau peut être utile pour traiter des problèmes faisant intervenir une dimension radiale. Ce réseau découlant de la combinaison des polynômes de Legendre et de la transformation bijective définie par

$$u = t(x) = 2x - 1 \quad x \in [0, 1], \quad (2.102)$$

nous pouvons déterminer ses caractéristiques à partir des expressions développées ci-dessus et à la section 2.4. Les points de ce nouveau réseau sont donc donnés par la formule suivante

$$x_i = \frac{1 + u_i}{2} \quad (2.103)$$

où u_i représente un zéro du polynôme de Legendre de degré N , c'est-à-dire $P_N(u_i) = 0$. Autrement dit, les points du réseau de Legendre translaté correspondent aux points du réseau de Legendre effectivement translaté sur l'intervalle $[0, 1]$. Leur répartition est donc semblable à celle du réseau de Legendre, et fait apparaître une concentration autour des deux extrémités 0 et 1. Conformément à (2.50), les poids λ_i du nouveau réseau sont reliés aux poids $\tilde{\lambda}_i$ du réseau de Legendre selon

$$\lambda_i = \frac{\tilde{\lambda}_i}{2} \quad (2.104)$$

avec les poids $\tilde{\lambda}_i$ qui sont donnés par (2.95).

En combinant les relations (2.51) et (2.97), nous obtenons les fonctions de Lagrange correspondant à ce réseau de Legendre translaté

$$f_i(x) = (-)^{i+N} \sqrt{x_i(1-x_i)} \frac{P_N(2x-1)}{x-x_i}. \quad (2.105)$$

Ces fonctions de Lagrange sont équivalentes aux fonctions de Lagrange correspondant au réseau de Legendre (figure 2.5) translattées sur l'intervalle $[0, 1]$.

Les valeurs des dérivées première et seconde de $f_i(x)$ aux points x_i du réseau sont obtenues à l'aide des expressions (2.52) et (2.53) en les combinant avec les relations (2.98) à (2.101) correspondant au réseau de Legendre sur $[-1, 1]$.

Comme dans le cas du réseau de Legendre sur $[-1, 1]$, la dérivée seconde $f_j''(x)$ s'exprime sous la forme d'un polynôme en x de degré $N-3$. Les éléments de matrice T_{ij} de l'énergie cinétique (2.3) sont pour cette raison évalués exactement par (2.4).

2.7.3 Réseau de Laguerre

Ce réseau est basé sur les polynômes de Laguerre, appartenant, comme les polynômes de Legendre, à la famille des polynômes orthogonaux classiques (Annexe A). Nous allons donc à nouveau suivre la procédure de construction décrite à la section 2.3.2. Dans cette section, nous ne considérons que le cas particulier des polynômes de Laguerre de paramètre $\alpha = 0$ (Annexe A). Ces polynômes sont définis sur l'intervalle $[0, \infty[$, et sont orthogonaux relativement à la fonction poids $w(x) = e^{-x}$. Comme pour tous les réseaux basés sur des polynômes orthogonaux, les points du réseau sont définis par les zéros du polynôme en question. Dans ce cas-ci, les points x_i du réseau de Lagrange-Laguerre correspondent aux N zéros du polynôme de Laguerre de degré N

$$L_N(x_i) = 0 \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.106)$$

Ces N points se répartissent dans l'intervalle $[0, \infty[$ tel que représenté à la figure 2.6. Ces points présentent un espacement qui augmente de façon ex-

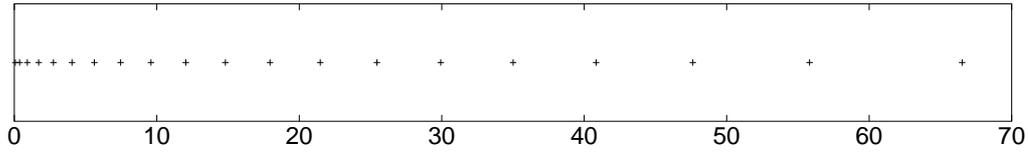


FIG. 2.6 – Distribution des points d'un réseau de Lagrange-Laguerre, avec $N=20$

ponentielle lorsque l'on s'éloigne de l'origine. La concentration des points est donc importante près de l'origine, et se réduit progressivement lorsque i tend vers N .

Les poids λ_i associés aux points x_i du réseau peuvent être déterminés à l'aide de la relation (2.31)

$$(\lambda_i e^{-x_i})^{-1} = x_i (L'_N(x_i))^2. \quad (2.107)$$

D'après (2.32), les fonctions de Lagrange basées sur les polynômes de Laguerre s'écrivent sous la forme suivante

$$f_i(x) = \left(\frac{e^{-x}}{\lambda_i e^{-x_i}} \right)^{1/2} \frac{L_N(x)}{L'_N(x_i)(x - x_i)} \quad (2.108)$$

ou encore, en tirant $L'_N(x_i)$ de (2.107),

$$f_i(x) = (-)^i x_i^{1/2} \frac{L_N(x)}{x - x_i} e^{-x/2} \quad (2.109)$$

où le facteur de phase $(-)^i$ découle de (2.107), car λ_i est toujours positif.

Sur la figure 2.7 sont représentées les fonctions de Lagrange $f_i(x)$ (2.109) correspondant à un réseau de $N = 4$ points. Les points du réseau sont indiqués à l'aide de croix. Une caractéristique de ces fonctions $f_i(x)$ est leur décroissance exponentielle lorsque x tend vers l'infini.

Comme pour le réseau de Lagrange-Legendre, nous déterminons les expressions des dérivées première et seconde de la fonction de Lagrange-Laguerre en un point du réseau de Laguerre en utilisant les relations (2.41) à (2.44) Lorsque $i \neq j$, nous obtenons pour la dérivée première

$$f'_i(x_j) = \lambda_j^{-1/2} \frac{(-)^{i+j}}{x_j - x_i} \sqrt{\frac{x_i}{x_j}}, \quad (2.110)$$

et, lorsque $i = j$

$$f'_i(x_i) = -\frac{\lambda_i^{-1/2}}{2x_i}. \quad (2.111)$$

La dérivée seconde, quant à elle, s'écrit, pour $i \neq j$

$$f''_i(x_j) = (-)^{i+j+1} \lambda_j^{-1/2} \sqrt{\frac{x_i}{x_j}} \frac{3x_j - x_i}{x_j(x_j - x_i)^2}, \quad (2.112)$$

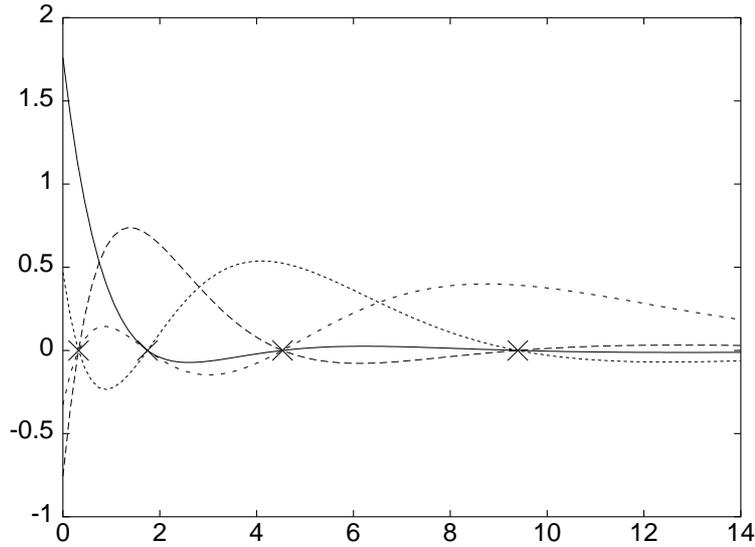


FIG. 2.7 – Fonctions de Lagrange-Laguerre associées à un réseau de $N = 4$ points, représentés par des croix.

et, pour $i = j$

$$f_i''(x_i) = \lambda_i^{-1/2} \frac{x_i^2 - 2(2N + 1)x_i + 8}{12x_i^2}. \quad (2.113)$$

Les éléments de matrice de l'opérateur $-d^2/dx^2$ entre fonctions de Lagrange-Laguerre s'expriment dans ce cas-ci selon

$$T_{ij} = - \int_0^\infty dx f_i(x) f_j''(x) = -\lambda_i^{1/2} f_j''(x_i). \quad (2.114)$$

La présence de la fonction poids, qui a la forme d'une exponentielle, dans la fonction de Lagrange-Laguerre $f_j(x)$ induit que la dérivée seconde de celle-ci s'écrit sous la forme d'un polynôme de même degré que $f_j(x)$. Néanmoins ce degré étant égal à $N - 1$, l'approximation de Gauss permet d'évaluer exactement l'intégrale définissant T_{ij} .

2.7.4 Réseau de gaussiennes

Il s'agit d'un réseau basé sur des polynômes orthogonaux non-classiques. Il a été développé à partir de l'analyse des fonctions gaussiennes suivantes

$$\chi_n(x) = e^{-(x-an)^2/2} - e^{-(x+an)^2/2} \quad (2.115)$$

avec $n = 1/2, \dots, (N-1)/2$ où N est pair, et a est un paramètre. Ces fonctions χ_n sont définies sur l'intervalle $[0, \infty[$ [BV99], et peuvent encore s'écrire

$$\chi_n(x) = 2e^{a^2n^2/2} e^{-x^2/2} \sinh(anx) \quad (2.116)$$

où $\sinh(x)$ est la fonction sinus hyperbolique. Puisque n ne peut prendre que les valeurs demi-entières comprises entre $1/2$ et $(N-1)/2$, nous posons $n = k/2$, où k est un entier impair. En changeant les notations, (2.116) s'écrit

$$\chi_n(x) = \bar{\chi}_k(x) = 2e^{a^2k^2/8} e^{-x^2/2} \sinh(kax/2). \quad (2.117)$$

Il est possible d'exprimer le facteur $\sinh(kax/2)$ en fonction de puissances de la forme $\sinh^m(ax/2)$, où m est, comme k , un entier impair. La base formée des fonctions $\bar{\chi}_k(x)$ (2.117) est donc équivalente à celle des fonctions φ_k qui s'écrivent

$$\varphi_k(x) = e^{-x^2/2} \sinh(ax/2) p_k[\sinh^2(ax/2)] \quad (2.118)$$

avec le polynôme p_k de degré k , où $k = 0, \dots, N-1$. La comparaison de cette fonction φ_k avec les expressions développées aux sections 2.3.2 et 2.4 nous fournit la fonction poids

$$w(x) = e^{-x^2} \sinh^2(ax/2) \quad (2.119)$$

et la transformation bijective

$$t(x) = \sinh^2(ax/2). \quad (2.120)$$

A l'aide de ces éléments il est alors possible de construire les polynômes p_k . En effet, les coefficients de leur relation de récurrence peuvent être déterminés en utilisant les relations (A.16) et (A.17). Les polynômes étant définis, nous pouvons identifier les N points du réseau aux zéros du polynôme de degré N . Ceux-ci sont caractérisés par une distribution de la forme représentée à la figure 2.8. Ce réseau présente un pas presque constant, ce dernier n'augmentant que

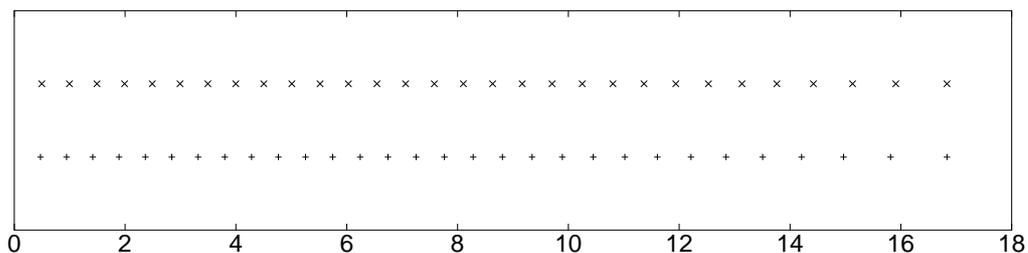


FIG. 2.8 – Distribution des points de réseaux de Lagrange basé sur des gaussiennes, avec $N=30$. Les signes $+$ correspondent à un paramètre a égal à 0.3, et les \times à a égal à 0.5. Pour faciliter la comparaison, les zéros obtenus avec $a = 0.3$ ont subi une dilatation de 1.33 faisant correspondre le dernier point avec celui du réseau avec $a = 0.5$.

très légèrement en s'éloignant de l'origine.

Les fonctions de Lagrange correspondantes sont quant à elles données par (2.32) et (2.51). Elles sont représentées à la figure 2.9 dans le cas d'un réseau de $N = 4$ points, et pour un paramètre a égal à 0.5. Ces fonctions présentent une décroissance gaussienne à grande distance, et sont nulles à l'origine à cause de la fonction poids (2.119).

N'ayant pas de formules compactes pour les coefficients intervenant dans la relation de récurrence, nous ne donnons pas de forme explicite aux fonctions de Lagrange. Pour la même raison, et contrairement au cas des réseaux basés sur des polynômes orthogonaux classiques, il n'existe pas de forme compacte pour les termes d'énergie cinétique. Ceux-ci sont alors calculés numériquement à partir de la formule (2.6)

$$T_{ij} = \int_0^\infty dx f'_i(x) f'_j(x). \quad (2.121)$$

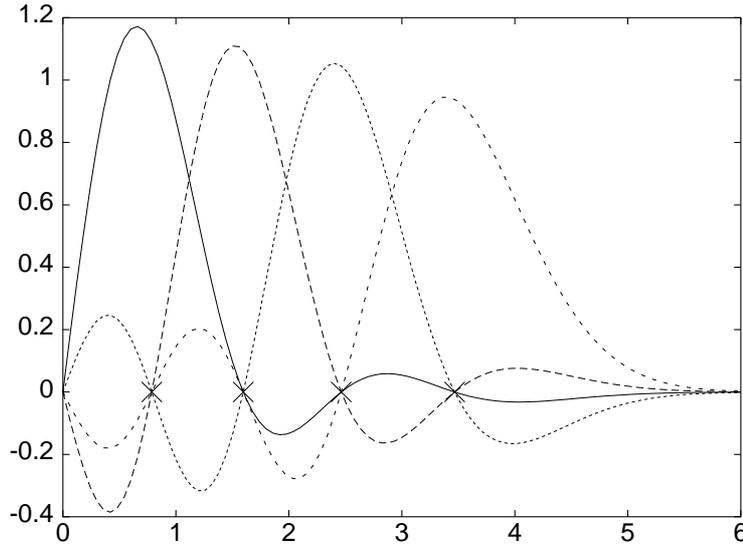


FIG. 2.9 – Fonctions de Lagrange correspondant à un réseau de $N = 4$ points. Le paramètre a du réseau vaut 0.5. Les croix indiquent la position des points du réseau.

Par opposition au cas des réseaux “classiques”, l’approximation de Gauss n’est ni exacte, ni même précise dans l’évaluation de ces intégrales.

2.7.5 Réseaux régularisés

Les propriétés des réseaux de Lagrange régularisés peuvent être facilement déduites de celles des réseaux non régularisés. A titre d’exemple, nous allons examiner le cas de la régularisation d’une singularité en $1/x^2$, telle que présentée à la section (2.5). Les fonctions de Lagrange régularisées s’écrivent alors

$$f_i(x) = \frac{x}{x_i} \hat{f}_i(x). \quad (2.122)$$

Les points du réseau ne sont évidemment pas modifiés. A partir de (2.122) nous pouvons facilement déterminer les dérivées première et seconde de f_i en fonction de celles de \hat{f}_i . Elles sont données explicitement par

$$f'_i(x) = \frac{1}{x_i} \hat{f}_i(x) + \frac{x}{x_i} \hat{f}'_i(x), \quad (2.123)$$

$$f''_i(x) = \frac{2}{x_i} \hat{f}'_i(x) + \frac{x}{x_i} \hat{f}''_i(x). \quad (2.124)$$

Ces deux relations permettent d’évaluer ces dérivées en un point du réseau connaissant les expressions des dérivées des fonctions de Lagrange non régularisées aux mêmes points.

Nous pouvons examiner ce qu’il advient des expressions obtenues précédemment pour les éléments de matrice de l’opérateur $-d^2/dx^2$. Nous ne considérons pas le cas du réseau de Legendre, puisque, celui-ci étant défini sur l’intervalle $[-1, 1]$, l’origine ne constitue pas un point particulier du domaine, et une régularisation du type (2.122) n’a pas d’intérêt.

Par contre le réseau de Legendre translaté, défini sur $[0, 1]$, peut servir à étudier des problèmes radiaux pour lesquels des termes centrifuges ou coulombiens existent. La fonction de Lagrange-Legendre translatée et régularisée fait donc intervenir un polynôme de degré N , et sa dérivée seconde s'exprime alors sous la forme d'un polynôme de degré $N - 2$. L'intégrand intervenant dans les éléments de matrice T_{ij} est alors polynomial de degré $2N - 2$, et la règle de quadrature de Gauss est toujours exacte. La formule (2.4) est donc encore exacte, avec les fonctions de Lagrange \hat{f}_j (2.105) qui doivent être remplacées par les fonctions régularisées f_j (2.122).

Dans le cas du réseau de Laguerre, les fonctions de Lagrange régularisées font également apparaître des polynômes de degré N . Il en est de même pour leur dérivée seconde, à cause de la fonction poids exponentielle. L'intégrand intervenant dans T_{ij} dépend alors d'un polynôme de degré $2N$, et l'approximation de Gauss n'est plus exacte. Deux traitements du terme T_{ij} sont alors possibles. Soit nous calculons exactement ces éléments de matrice, soit nous utilisons l'approximation de Gauss pour en obtenir une valeur approchée.

Dans le premier cas, nous pouvons évaluer les éléments T_{ij} à l'aide des relations vérifiées par les polynômes de Laguerre et présentées à l'annexe A. Après calculs nous obtenons

$$T_{ij} = \frac{(-)^{i+j}}{\sqrt{x_i x_j}} \frac{x_i + x_j}{(x_i - x_j)^2} + \frac{(-)^{i+j+1}}{4\sqrt{x_i x_j}} \quad (2.125)$$

pour $i \neq j$, et

$$T_{ii} = \frac{1}{12x_i^2} [4 + (4N - 1)x_i - x_i^2] \quad (2.126)$$

pour $i = j$.

Dans le deuxième cas, nous évaluons T_{ij} en utilisant la règle de quadrature de Gauss, ce qui nous fournit les approximations

$$T_{ij}^{Gauss} = \frac{(-)^{i+j}}{\sqrt{x_i x_j}} \frac{x_i + x_j}{(x_i - x_j)^2} \quad (2.127)$$

pour $i \neq j$, et

$$T_{ii}^{Gauss} = \frac{1}{12x_i^2} [4 + (4N + 2)x_i - x_i^2] \quad (2.128)$$

pour $i = j$.

La différence entre les expressions exactes (2.125) et (2.126) et approchées (2.127) et (2.128) se réduit à un terme qui vaut

$$T_{ij} - T_{ij}^{Gauss} = \frac{(-)^{i+j+1}}{4\sqrt{x_i x_j}}. \quad (2.129)$$

Ce terme est équivalent à l'erreur faite sur le produit scalaire des fonctions de Lagrange-Laguerre régularisée lorsque l'approximation de Gauss est utilisée. En effet nous pouvons calculer ce produit scalaire exactement, ce qui nous donne

$$\int_0^\infty dx f_i(x) f_j(x) = \delta_{ij} + \frac{(-)^{i+j}}{\sqrt{x_i x_j}}. \quad (2.130)$$

L'erreur faite sur les éléments de matrice de l'opérateur $-\frac{d^2}{dx^2}$ est donc égale au quart de celle sur le produit scalaire, lorsque ces éléments sont évalués à l'aide de l'approximation de Gauss.

Chapitre 3

Méthodes de résolution sur réseau de l'équation de Schrödinger

3.1 Introduction

Après avoir défini la méthode des réseaux de Lagrange au chapitre précédent, il est intéressant de la comparer à d'autres méthodes de résolution d'équations différentielles du type de l'équation de Schrödinger. De manière générale ces méthodes peuvent se classer en deux familles, correspondant aux méthodes locales et globales. Dans les méthodes locales, le domaine est subdivisé en plusieurs intervalles et les fonctions de base du calcul correspondent à des fonctions définies par morceaux, correspondant à ces intervalles. Dans les méthodes globales, les fonctions de base sont définies globalement sur tout le domaine et sont indéfiniment dérivables. Remarquons que nous avons choisi une définition relativement stricte des méthodes globales. Certains auteurs [GB74] parlent en effet de méthode globale même lorsque leurs fonctions de base ne sont pas indéfiniment dérivables.

Les méthodes locales ont pour avantage une flexibilité leur permettant de traiter des géométries et des frontières de forme complexe. Il s'agit par exemple des méthodes de différences finies [Euv94], ou d'interpolation [Pre75]. De leur côté, les méthodes globales présentent l'avantage de fournir une plus grande précision de calcul que les méthodes locales, mais ne sont pas bien adaptées aux géométries complexes. Nous retrouvons dans cette famille les méthodes spectrales, telle que la méthode de Galerkin [MM81], et pseudo-spectrales, comme la méthode DVR [LHL85]. La méthode des réseaux de Lagrange fait également partie de la famille des méthodes globales de résolution.

Nous allons maintenant examiner plus en détails quelques méthodes de résolution afin d'établir des liens avec la méthode des réseaux de Lagrange. Dans ce but nous considérons dans la suite l'exemple de l'équation de Schrödinger à une dimension (2.8) avec le hamiltonien (2.7)

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x). \quad (3.1)$$

3.2 Méthodes locales

Dans les méthodes locales, le domaine de définition du problème est subdivisé en un certain nombre d'intervalles. La solution de l'équation à résoudre y est approchée par une fonction d'essai qui prend la forme d'une combinaison linéaire de fonctions définies par morceaux, correspondant aux différents intervalles. Les méthodes les plus connues sont probablement les méthodes aux différences finies et aux éléments finis [Euv94]. Ces méthodes génèrent une discrétisation des équations à résoudre. Celles-ci prennent la forme (2.17)

$$\sum_{j=1}^N (T_{ij} + V(x_i)\delta_{ij} - E\delta_{ij})\Psi(x_j) = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (3.2)$$

où la matrice cinétique T_{ij} s'écrit par exemple

$$T = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ 0 & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

dans le cas d'une discrétisation centrée à trois points de pas h [AS65, Euv94]. D'autres techniques de discrétisation à trois points ont été développées afin d'améliorer la précision, telle que la méthode de Numérov [CXS93]. Bien entendu la manière la plus simple d'augmenter la précision consiste à utiliser une discrétisation basée sur plus de trois points. Néanmoins la précision évoluant comme une puissance du pas h , toutes ces méthodes nécessitent un petit pas, et par conséquent un grand nombre de points (en pratique souvent quelques milliers) pour représenter correctement tout le domaine, et fournir des résultats précis. La matrice décrivant l'opérateur hamiltonien est donc de très grande taille, mais également fort creuse. Cette matrice présente en effet une structure bande, dont la largeur dépend du nombre de points utilisés dans la discrétisation des opérateurs différentiels. Dans la méthode à trois points considérée plus haut, la matrice hamiltonienne est tridiagonale (3.3).

Les méthodes locales sont basées sur les méthodes d'interpolation, telles que les polynômes d'interpolation de Lagrange et les fonctions splines [Sho73, Pre75]. Les polynômes d'interpolation de Lagrange permettent notamment de déterminer certaines formules de discrétisation de la méthode des différences finies. La matrice (3.3) est par exemple obtenue à partir des polynômes d'interpolation de Lagrange de degré deux et d'un réseau à pas constant. Cette méthode d'interpolation est également à l'origine du nom de la méthode des réseaux de Lagrange. Cette dénomination découle en effet de la ressemblance entre les conditions de Lagrange satisfaites par les fonctions de Lagrange, et les conditions que vérifient les polynômes d'interpolation de Lagrange aux points d'interpolation. Les fonctions de Lagrange se distinguent cependant des polynômes d'interpolation puisqu'elles sont indéfiniment dérivables.

Les fonctions splines sont quant à elles fort utilisées en physique atomique et moléculaire [Sho73, GB74, Pre75]. Dans cette méthode, le domaine est décomposé en intervalles délimités par un ensemble de points x_k , appelés nœuds (“knots” en anglais), généralement uniformément répartis [Pre75]. Les fonctions splines de degré M sont alors définies comme des fonctions dont les dérivées sont continues jusqu’à l’ordre $M - 1$, et qui prennent la forme d’un polynôme de degré M sur chaque intervalle. Il existe deux types de fonctions splines utilisées comme fonctions de base pour la fonction d’essai : les B-splines et les splines cardinales. Une fonction B-spline d’ordre M est une fonction polynomiale non nulle uniquement sur $M + 1$ intervalles consécutifs. Sur chacun de ceux-ci, elle prend la forme d’un polynôme de degré M . Ces polynômes sont déterminés à partir des conditions de continuité aux nœuds. Les B-splines sont de plus définies positives, et n’admettent qu’un seul maximum. Les splines cardinales [GB74] sont par contre définies sur tous les intervalles en satisfaisant des conditions de continuité aux nœuds. Elles sont dénommées cardinales car elles possèdent la propriété

$$\phi_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad (3.4)$$

c’est-à-dire que la fonction spline cardinale ϕ_i s’annule en tous les nœuds x_j sauf un. La propriété (3.4) correspond aux conditions de Lagrange (2.1) dans le cas de la méthode des réseaux de Lagrange. Ces splines cardinales présentent ainsi une ressemblance avec les fonctions de Lagrange associées à un réseau à pas constant. Elles ne sont cependant pas indéfiniment dérivables. Bien souvent, lorsque les nœuds sont équidistants, les N fonctions splines de base sont construites à partir d’une même fonction spline centrée successivement aux N nœuds du réseau.

Si nous examinons la forme des termes cinétique et potentiel, nous constatons que les deux types de base de splines conduisent à des expressions différentes. Elles ont néanmoins un point commun qui est de ne pas être orthogonales, c’est-à-dire que la résolution de l’équation de Schrödinger (2.8) fait intervenir un problème généralisé de la forme (2.12)

$$\sum_{j=1}^N (H_{ij} - EN_{ij})c_j = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (3.5)$$

où $H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle$ et $N_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle$ représentent les éléments de matrice du hamiltonien et du produit scalaire, et les c_j sont les coefficients définissant la fonction d’essai dans la base des fonctions splines. Dans le cas des B-splines, les matrices hamiltonienne et de norme ont une forme semblable à celle de la méthode des différences finies, c’est-à-dire que ce sont des matrices bandes. Les fonctions B-splines ne sont en effet non nulles que sur $M + 1$ intervalles. La méthode des splines est en général basée sur l’approche de Galerkin (voir plus loin), et les intégrales des termes cinétique, potentiel et de norme sont calculées exactement ou numériquement. Elle se distingue donc principalement des méthodes sur réseaux par le terme potentiel qui ne conduit pas à une matrice purement diagonale. L’approche de collocation aux nœuds x_k conduit également à des matrices bandes, mais non symétriques. Elle fournit cependant de moins bons résultats que l’approche de Galerkin [Sho73]. La méthode des

splines cardinales est moins intéressante que les B-splines puisque les matrices hamiltonienne et de norme sont pleines dans ce cas. Ces fonctions sont en effet définies sur tout le domaine et ne s'annulent qu'aux nœuds x_k , contrairement aux B-splines.

3.3 Méthodes globales

Nous allons maintenant examiner les méthodes spectrales [GO77], qui peuvent être vues comme un développement de la classe des schémas de discrétisation des équations différentielles connue sous le nom de méthode des résidus pondérés. Les éléments clés de cette méthode sont les fonctions de base et les fonctions test (encore appelées fonctions poids). Les fonctions de base sont utilisées dans un développement tronqué de la solution. Quant aux fonctions test, elles servent à s'assurer que l'équation différentielle est satisfaite autant que possible par le développement limité. Ceci est obtenu en minimisant le résidu, c'est-à-dire l'erreur dans l'équation différentielle produite par l'utilisation d'un développement tronqué, vis-à-vis d'une certaine norme. Autrement dit une approximation de la solution de l'équation différentielle est obtenue en imposant à l'intégrale du résidu multiplié par chaque fonction test d'être nulle.

Dans les méthodes spectrales, les fonctions de base sont des fonctions globales, définies sur tout le domaine et indéfiniment dérivables. Selon le choix des fonctions test, nous avons les versions de Galerkin et de collocation [MM81, Pre75]. Dans l'approche de Galerkin, les fonctions test sont identiques aux fonctions de base. Elles sont donc indéfiniment dérivables et satisfont toutes les conditions aux limites. Cette approche correspond au calcul variationnel utilisant les fonctions de base [MFHB00]. Dans la méthode de collocation, les fonctions test sont des fonctions de Dirac translatées, centrées en certains points, appelés points de collocation. Cette approche impose donc au résidu d'être nul aux points de collocation [Fri85, YP88].

Pour mieux analyser le lien entre ces méthodes spectrales et la méthode des réseaux de Lagrange, nous allons considérer un exemple simple. Soit un système physique à une dimension, défini sur l'intervalle (a, b) , et représenté par le hamiltonien (3.1). Dans notre exemple, l'équation différentielle à résoudre est l'équation de Schrödinger stationnaire (2.8). Dans les méthodes spectrales, une solution approchée de l'équation est obtenue en imposant les conditions suivantes

$$\int_a^b dx w_i(x) (H - E) \Psi_N(x) = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (3.6)$$

où $w_i(x)$ est une fonction test, et la fonction d'essai $\Psi_N(x)$ s'exprime en fonction des fonctions de base $\phi_j(x)$

$$\Psi_N(x) = \sum_{j=1}^N c_j \phi_j(x). \quad (3.7)$$

Les méthodes globales se distinguent entre elles par le type de fonctions de base servant au développement tronqué (3.7) et par la manière de calculer les éléments de matrice des énergies cinétique et potentielle apparaissant dans

(3.6). Le choix des fonctions de base découle en général d'un compromis entre la précision en fonction du nombre N de fonctions et la simplicité des calculs. En pratique le nombre N de fonctions pour un problème à une dimension est généralement de l'ordre de quelques dizaines.

Particularisons maintenant les conditions (3.6) au cas des approches de Galerkin et de collocation. Dans le cas de la méthode de Galerkin, la fonction test $w_i(x)$ est équivalente à la fonction de base $\phi_i(x)$. En explicitant l'opérateur hamiltonien (3.1), les conditions (3.6) se réécrivent

$$\sum_{j=1}^N c_j \left[- \int_a^b dx \phi_i(x) \phi_j''(x) + \int_a^b dx \phi_i(x) V(x) \phi_j(x) - E \int_a^b dx \phi_i(x) \phi_j(x) \right] = 0$$

$$i = 1, \dots, N. \quad (3.8)$$

Nous retrouvons alors l'expression variationnelle classique (2.12), pour une fonction approchée qui a la forme d'une combinaison linéaire de fonctions de base $\phi_j(x)$. L'emploi de fonctions de Lagrange ($\phi_i = f_i$) et de l'approximation de Gauss dans le calcul de ces différentes intégrales nous ramène aux équations obtenues avec la méthode des réseaux de Lagrange (2.17)

$$\sum_{j=1}^N c_j \left[-\lambda_i^{1/2} f_j''(x_i) + (V(x_i) - E) \delta_{ij} \right] = 0 \quad i = 1, \dots, N. \quad (3.9)$$

Dans le cas de la méthode de collocation, les fonctions test sont des fonctions de Dirac

$$w_i(x) = \delta(x - x_i) \quad (3.10)$$

où les x_i désignent les points de collocation. Les conditions (3.6) se réduisent alors aux expressions

$$\sum_{j=1}^N c_j \left[-\phi_j''(x_i) + V(x_i) \phi_j(x_i) - E \phi_j(x_i) \right] = 0 \quad i = 1, \dots, N. \quad (3.11)$$

Ces équations sont identiques aux formules des réseaux de Lagrange (3.9) si les fonctions de base $\phi_j(x)$ sont des fonctions de Lagrange $f_j(x)$ vérifiant les conditions (2.1). La méthode des réseaux de Lagrange peut donc être vue comme un cas particulier des méthodes spectrales, située à l'intersection des méthodes de Galerkin et de collocation.

Sur base de la présentation générale des méthodes spectrales faite ci-dessus, nous pouvons analyser quelques méthodes rencontrées dans la littérature.

3.3.1 Méthodes DVR et des réseaux de Lagrange

Une méthode fort utilisée, notamment en physique moléculaire, est la méthode de la variable discrétisée (DVR : Discrete Variable Representation). L'origine de cette méthode remonte aux années 60. En 1965, Harris, Engerholm et Gwinn [HEG65] présentent une technique pour résoudre l'équation de Schrödinger. Elle consiste, à partir d'une base de fonctions ϕ_j choisies, à

diagonaliser la représentation X dans cette base de l'opérateur position, dont les éléments sont $X_{ij} = \langle \phi_i | X | \phi_j \rangle$

$$\mathcal{X} = T^{-1} X T \quad (3.12)$$

où \mathcal{X} est une matrice diagonale, et T est une matrice de transformation unitaire. Ces auteurs font ensuite l'approximation selon laquelle la représentation du potentiel V est également diagonalisée à l'aide de la même transformation T . La matrice représentant le potentiel V dans la base des fonctions initiales ϕ_j est donc déterminée à partir de la matrice diagonale $\mathcal{V}(\mathcal{X})$ formée du potentiel évalué aux points $x_i = \mathcal{X}_{ii}$, correspondant aux valeurs propres de la matrice X , et de la transformation inverse T^{-1}

$$\langle \phi_i | V | \phi_j \rangle \approx \left(T \mathcal{V}(\mathcal{X}) T^{-1} \right)_{ij}. \quad (3.13)$$

Le terme cinétique est quant à lui évalué exactement dans la base des fonctions ϕ_j . Les auteurs appliquent leur technique à un problème d'oscillateur anharmonique, en utilisant une base de fonctions d'oscillateur harmonique. Ils examinent également l'erreur faite sur la matrice potentielle sur base du développement en série de Taylor de celui-ci. Cette méthode est également appliquée au potentiel de Morse, et étendue à deux dimensions par Endres [End67].

En 1968, Dickinson et Certain [DC68] effectuent une avancée importante en établissant le lien entre la méthode de [HEG65] et la quadrature de Gauss lorsque la base de fonctions est construite à partir de polynômes orthogonaux. Néanmoins la méthode reste peu utilisée et il faut attendre les années 80 pour observer un regain d'intérêt pour celle-ci. Lill, Parker et Light [LPL82] et Heather et Light [HL83] introduisent la méthode DVR qu'ils couplent à la méthode de la base finie (FBR : Finite Basis Representation) pour étudier le problème des collisions en physique moléculaire. La méthode FBR correspond au calcul avec une base de fonctions choisies, dans lequel les éléments de matrice du potentiel sont déterminés en employant une règle de quadrature de Gauss. La méthode DVR consiste quant à elle à utiliser la représentation, c'est-à-dire la base, dans laquelle la matrice potentielle est approchée par une matrice diagonale déterminée à partir du potentiel évalué aux points définissant la quadrature de Gauss. Les deux représentations, DVR et FBR, peuvent être reliées par une transformation unitaire (3.13), et sont donc équivalentes. Cette méthode DVR, qualifiée de standard, reste basée sur les polynômes orthogonaux classiques. Elle est donc équivalente à la méthode des réseaux de Lagrange, mais diffère dans sa mise en œuvre puisque les fonctions de Lagrange n'y sont pas construites.

Dans les années 80, Shizgal et Blackmore introduisent indépendamment une méthode qu'ils dénomment DOM (Discrete Ordinate Method) [SB84, BS85]. Cette méthode est en fait totalement équivalente à la méthode DVR. Elle est basée sur une base de polynômes orthogonaux et sur la quadrature de Gauss associée. Les éléments de matrice des opérateurs différentiels y sont déterminés en les calculant dans la base des polynômes orthogonaux et en effectuant ensuite la transformation vers la représentation DVR, dans laquelle la matrice

de l'opérateur X est diagonale. Les auteurs appliquent leur méthode à la résolution de problèmes aux valeurs propres caractérisés par divers opérateurs différentiels.

En 1985, Light, Hamilton et Lill [LHL85] publient la première analyse approfondie de la méthode DVR. Ces auteurs prônent l'utilisation de la représentation DVR, caractérisée par l'ensemble de points x_k , comme représentation principale, et non plus comme intermédiaire de calcul, tel que présenté dans la plupart des travaux précédents (cf article [HEG65] où la matrice diagonale du potentiel est ramenée dans la représentation des fonctions de base à l'aide d'une transformation unitaire). L'avantage de la représentation DVR est de fournir une matrice du potentiel diagonale très simple. La méthode DVR est basée sur le couplage entre un ensemble de points x_i et un ensemble de fonctions ϕ_j reliés par une certaine transformation T . Les fonctions ϕ_j sont supposées être les fonctions propres d'un hamiltonien simplifié, dont la matrice dans la représentation DVR est déterminée exactement à partir de sa représentation dans la base ϕ_j , et de la matrice de transformation T . Bien que les résultats soient meilleurs lorsque les deux ensembles définissent une règle de quadrature de Gauss, la méthode est encore valable dans le cas de quadratures plus générales. Ceci rejoint la motivation de la méthode DVR qui est de fournir la meilleure précision possible à partir d'un ensemble de points pouvant être quelconque. En effet, en physique moléculaire, domaine d'origine de la méthode, le potentiel n'est parfois connu qu'en certains points, et une quadrature de Gauss associée à ces points n'existe pas toujours. Dans leur article, les auteurs effectuent une comparaison entre la DVR, la FBR et le calcul variationnel exact avec la base des fonctions ϕ_j (dénommé VBR, Variational Basis Representation, par ces auteurs). Comme indiqué précédemment, les deux représentations DVR et FBR sont équivalentes. Cet article marque le renouveau de la méthode DVR, qui est par la suite de plus en plus utilisée. Nous pouvons citer entre autres : Bačić et Light [BL86], et Leforestier [Lef91] déterminent avec la méthode DVR certains états liés de molécules triatomiques ; Colbert et Miller [CM92] l'utilisent pour étudier des collisions entre molécules ; Corey et Lemoine [CL92a] s'en servent pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps ; Melezhik [Mel93] l'applique à l'atome d'hydrogène à trois dimensions plongé dans des champs électriques et magnétiques.

De son côté, Schwartz [Sch85] construit des fonctions d'interpolation associées aux points d'un réseau. Se voulant général, il ne développe pas le lien entre ses fonctions et l'approximation de Gauss. Il établit cependant les équations de type DVR pour un réseau à pas constant. C'est à cette époque que Baye et Heenen [BH86] publient le premier article sur la méthode des réseaux de Lagrange, où ils développent le réseau de Fourier et les réseaux basés sur des polynômes orthogonaux.

D'autres auteurs développent davantage la méthode DVR, ou l'étendent à certains problèmes particuliers. En 1988, Manolopoulos et Wyatt [MW88] présentent une méthode similaire à la DVR mais en suivant une procédure différente. Contrairement à la DVR "traditionnelle" [LHL85], dont le point de départ est un ensemble de fonctions auquel est associé un ensemble de points, les auteurs débutent avec un ensemble de points correspondant à une qua-

drature de Lobatto, qui est une quadrature de Gauss dans laquelle deux des points sont fixés aux extrémités de l'intervalle d'intégration. Des fonctions, dites de Lobatto, sont ensuite définies comme les polynômes d'interpolation de Lagrange aux points de la quadrature. Ces fonctions sont alors utilisées pour déterminer la matrice de l'énergie cinétique, tandis que la matrice potentielle prend la forme diagonale typique de la méthode DVR. En se basant sur [MW88], Muckerman [Muc90] considère la méthode DVR en explicitant la base de fonctions s'annulant en tout point du réseau sauf un, à partir des fonctions choisies initialement. En procédant ainsi, Muckerman rejoint l'optique de la méthode des réseaux de Lagrange, les fonctions obtenues par sa procédure étant les fonctions de Lagrange associées à son réseau. Weaver, Muckerman et Uzer [WMU92] utilisent la même procédure pour construire des fonctions de base, qui sont en fait des fonctions de Lagrange, pour étudier l'atome d'hydrogène à deux dimensions. Ils n'établissent cependant pas d'expression compacte pour leurs fonctions, qui sont basées sur les polynômes de Laguerre et de Legendre. Dans leurs calculs ils emploient l'approximation de Gauss pour évaluer non seulement le terme potentiel mais également le terme cinétique.

En 1992, Light [Lig92] passe en revue les formulations antérieures de la méthode DVR, en remarquant que, bien que présentées de manière générale, leur mise en application est basée dans la plupart des cas sur un réseau de points correspondant à une quadrature de Gauss. Light effectue également une comparaison avec la méthode de collocation, les équations de la DVR représentant une méthode de collocation particulière dont la précision est maximale. La méthode de collocation basée sur les fonctions ϕ_j est équivalente à la DVR standard [LPL82] si trois conditions sont remplies :

- la matrice d'éléments $\phi_j(x_i)$, où x_i est un point du réseau, est une matrice orthogonale
- l'action de l'opérateur énergie cinétique sur une fonction de base ϕ_j produit une fonction pouvant être représentée entièrement dans la base
- la base est orthonormée.

Néanmoins, en général, les points de collocation sont quelconques, et la matrice hamiltonienne correspondante est non hermitique. Il s'ensuit que les valeurs propres de cette matrice ne sont pas nécessairement toutes réelles. C'est en ce sens que la méthode DVR peut être vue comme une méthode de collocation de précision maximale. Light présente également la technique, décrite par Muckerman [Muc90], pour construire des fonctions satisfaisant les conditions de Lagrange aux points du réseau à partir de fonctions de base ϕ_j choisies. Il montre notamment que ces fonctions, qui sont des fonctions de Lagrange, n'existent que si les produits scalaires de toutes les fonctions ϕ_j sont évalués exactement par la quadrature à N points associée au réseau.

Lemoine [Lem94a, Lem94b] étend la méthode DVR aux problèmes à deux dimensions avec une base qui ne prend pas la forme d'un produit direct. Ceci le conduit à analyser les transformations de Bessel cylindriques et sphériques discrètes, apparaissant en considérant comme fonctions de base les fonctions propres de l'opérateur laplacien. En utilisant l'exemple de la détermination des états liés de l'oscillateur harmonique, il conclut que les transformations de Bessel pour un produit non-direct de fonctions sont moins précises que pour

un produit direct, mais la perte de précision reste cependant raisonnable. Sa transformation de Bessel discrète est comparable à la transformation de Fourier discrète, en ce qui concerne la précision et l'efficacité.

Hall et Rees [HR95] introduisent un ensemble de fonctions localisées orthonormées définies comme les fonctions propres de l'opérateur position, les valeurs propres correspondant aux points d'un réseau. Ils établissent ainsi un lien entre leurs fonctions et la méthode DVR. Leur développement est basé sur les polynômes orthonormés. A partir de ceux-ci, ils construisent des fonctions localisées aux points du réseau, c'est-à-dire qu'elles s'annulent en tout point de ce réseau sauf un. Les fonctions ainsi obtenues sont en fait les fonctions de Lagrange correspondant aux polynômes. Ces auteurs évaluent le potentiel aux points du réseau sans utiliser l'approximation de Gauss. Ils étudient ensuite l'erreur ainsi introduite dans le calcul des éléments de matrice dans la base de leurs fonctions localisées.

Corey et Tromp [CT95] généralisent la méthode DVR en introduisant plus de points x_k que de fonctions de base spectrales ϕ_j . Ceci leur permet de rétablir le principe variationnel, les points supplémentaires servant à compenser l'erreur introduite en employant une règle de quadrature.

Comme indiqué auparavant [LHL85], la précision des résultats de la méthode DVR est meilleure lorsque les points x_i définissent avec les fonctions ϕ_j une règle de quadrature de Gauss. Dans ce cas, nous retrouvons la méthode des réseaux de Lagrange, la représentation $\{x_i\}$ étant alors équivalente à la base des fonctions de Lagrange, et les fonctions ϕ_j sont les fonctions à l'origine des fonctions de Lagrange. Par exemple pour les réseaux de Lagrange basés sur des polynômes orthogonaux, les fonctions ϕ_j correspondent à ces polynômes (voir chapitre 2). La méthode des réseaux de Lagrange constitue en ce sens une sous-classe des méthodes DVR, pour laquelle la précision est améliorée. Ceci apparaît plus clairement dans la reformulation et la généralisation de la méthode DVR, renommée GDVR (Generalized DVR), faite par Szalay [Sza96].

Soient une base $\chi_n(x)$ ($n = 0, \dots, N-1$), non nécessairement polynomiale, orthonormée avec la fonction poids réelle $w(x)$, N points x_i de l'espace des configurations et N poids w_i supposés réels. Les points x_i et les poids w_i définissent une règle de quadrature permettant d'approcher l'intégrale d'une fonction $G(x)$

$$\int_a^b dx w(x) G(x) \approx \sum_{i=1}^N w_i G(x_i). \quad (3.14)$$

Les poids w_i sont ainsi reliés aux poids λ_i apparaissant dans la méthode des réseaux de Lagrange par $w_i = w(x_i)\lambda_i$ (voir l'annexe A). La relation (3.14) correspond à la règle de quadrature de Gauss lorsque les fonctions χ_n sont des polynômes orthogonaux. Szalay [Sza96] définit les fonctions de base GDVR par les équations

$$\phi_i(x) = w^{1/2}(x) \sum_{kl} \chi_k(x) F_{kl} U_{li} \quad (3.15)$$

où les éléments de la matrice F sont

$$F_{kl} = \chi_k^*(x_l) w_l^{1/2} \quad (3.16)$$

et où U est la matrice de vecteurs propres de la matrice réelle définie positive

$$\mathcal{D} = F^\dagger F, \quad (3.17)$$

c'est-à-dire

$$\mathcal{D}U = U\Lambda \quad (3.18)$$

où Λ représente la matrice diagonale des valeurs propres. Lors de la résolution de l'équation de Schrödinger, le terme cinétique est calculé exactement dans la base (3.15), tandis que les éléments de matrice du potentiel sont calculés à l'aide de l'approximation (3.14).

Les fonctions de base (3.15) ne sont pas orthogonales, mais vérifient

$$\langle \varphi | \varphi^T \rangle = \Lambda \quad (3.19)$$

où φ représente la matrice colonne formée par les fonctions ϕ_i . La notation de Dirac représente le produit scalaire calculé exactement. Lorsque les intégrales sont effectuées en utilisant la quadrature (3.14), la notation de Dirac $\langle . | . \rangle$ est remplacée par la notation $(. | .)$. Lorsque le produit scalaire est évalué en utilisant cette quadrature nous obtenons

$$\langle \varphi | \varphi^T \rangle \approx (\varphi | \varphi^T) = \Lambda^2. \quad (3.20)$$

L'approximation (3.20) n'est donc pas exacte en général. Cependant le produit scalaire peut encore être déterminé exactement avec (3.14) en utilisant la forme

$$\langle \varphi | \varphi^T \rangle = (\Lambda^{-1} \varphi | \varphi^T). \quad (3.21)$$

Ceci suggère le calcul des éléments de matrice du potentiel selon

$$\langle \varphi | V | \varphi^T \rangle \approx (\Lambda^{-1} \varphi | V | \varphi^T) = U^\dagger \mathcal{V} U \Lambda, \quad (3.22)$$

où \mathcal{V} est la matrice potentielle diagonale dans laquelle le potentiel est évalué uniquement aux points x_i . Ceci conduit finalement au système d'équations

$$(T\mathcal{D}^{-1} + \mathcal{V})(U\Lambda C) = E(U\Lambda C) \quad (3.23)$$

où le vecteur C représente les coefficients de la fonction d'onde Ψ_N (3.7) dans la base (3.15). La matrice cinétique T est définie par

$$T = F^\dagger K F \quad (3.24)$$

où la matrice K est formée des éléments

$$K_{ij} = \langle w^{1/2}(x) \chi_i(x) | -\frac{d^2}{dx^2} | w^{1/2}(x) \chi_j(x) \rangle \quad (3.25)$$

dans la base des fonctions χ_i . Il faut noter que la matrice hamiltonienne tirée de (3.23) est asymétrique dans le cas général. Les valeurs de la fonction d'onde Ψ_N aux points x_i définissant la base GDVR sont données par

$$\Psi_N(x_i) \approx \lambda_i (U\Lambda C)_i \quad (3.26)$$

et sont donc obtenues directement en résolvant (3.23).

Dans le cas particulier de polynômes orthogonaux avec les points et les poids gaussiens correspondants, Λ est la matrice identité, et la formule (3.15) définit les fonctions de Lagrange à partir des polynômes orthogonaux. La matrice U définit la transformation unitaire reliant la base des fonctions de Lagrange à celle des polynômes orthogonaux. L'équation de Schrödinger (3.23) est alors équivalente à l'expression typique de la méthode des réseaux de Lagrange (3.9). Ceci confirme donc le lien entre les méthodes DVR et des réseaux de Lagrange, cette dernière étant un cas particulier, plus précis, de la première.

De son côté, Schneider [Sch97] décrit une procédure pour construire une base de fonctions orthonormées à partir d'une fonction de base et d'une fonction poids choisies. Les fonctions ainsi obtenues n'étant pas nécessairement des polynômes orthogonaux, il n'existe pas toujours de correspondance avec une quadrature de Gauss. Cependant, d'après [HEG65], en diagonalisant la matrice de l'opérateur position dans la base des fonctions, un réseau de points est obtenu, qui peut servir dans un calcul DVR. Ceci constitue donc une méthode générale de construction de fonctions avec le réseau de points associé pour un calcul DVR.

Karabulut et Sibert III [KS97a] développent quant à eux des réseaux à pas constant. En se basant sur [BH86], ils construisent les fonctions de Lagrange associées et déterminent les matrices d'énergie cinétique dans chaque cas. Ils se réfèrent néanmoins toujours à la DVR pour désigner leur méthode de calcul. Dans l'article [KS97b], ces mêmes auteurs construisent des polynômes gaussiens distribués et les quadratures associées. Ils établissent également les expressions des fonctions de Lagrange correspondantes. Suno, Andric, Grozdakov, et McCarroll [SAGM00] utilisent le réseau de Lagrange-Laguerre [BH86] pour déterminer des sections efficaces de photoionisation. Bien qu'ils suivent la formulation de la méthode des réseaux de Lagrange, ils qualifient leur calcul de DVR. Ces deux exemples illustrent l'intérêt porté à la méthode des réseaux de Lagrange, mais également la confusion existant entre les méthodes des réseaux de Lagrange et DVR, alors que leur motivation est différente. Le but de la méthode DVR est en effet de fournir les meilleurs résultats possibles à partir d'un réseau de points a priori quelconque, tandis que la méthode des réseaux de Lagrange est basée sur l'emploi d'un réseau de points tel que des fonctions de Lagrange, satisfaisant les conditions de Lagrange (2.1), existent.

3.3.2 Méthode du réseau de Fourier

Il existe une autre méthode constituant un cas particulier de la méthode DVR dans sa formulation originale [LHL85]. Il s'agit de la méthode du réseau de Fourier [Kos88, MB89]. L'idée à la base de cette méthode est que le terme potentiel de l'équation de Schrödinger est mieux représenté dans l'espace des coordonnées $|x\rangle$, alors que le terme cinétique est mieux représenté dans l'espace réciproque, c'est-à-dire l'espace des moments $|k\rangle$. Ces deux espaces sont reliés à l'aide de la matrice de transformation d'éléments

$$\langle k|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx}. \quad (3.27)$$

Le terme potentiel est diagonal dans l'espace $|x\rangle$

$$\langle x'|V|x\rangle = V(x)\delta(x - x'), \quad (3.28)$$

et le terme cinétique est diagonal dans l'espace $|k\rangle$

$$\langle k'|T|k\rangle = T_k\delta(k - k') = k^2\delta(k - k') \quad (3.29)$$

dans le cas de l'opérateur cinétique défini dans (3.1). Exprimé dans l'espace des coordonnées l'opérateur hamiltonien s'écrit

$$\langle x|H|x'\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')} T_k dk + V(x)\delta(x - x'). \quad (3.30)$$

Le terme cinétique fait apparaître une transformée de Fourier qui définit la transformation d'une représentation à l'autre.

Dans la méthode du réseau de Fourier, la base continue des coordonnées x est remplacée par un réseau discret de N points x_j uniformément répartis

$$x_j = j h \quad (3.31)$$

où h est l'écart constant entre les points du réseau. La normalisation de la fonction d'onde $\Psi_N(x)$ prend la forme

$$h \sum_{j=1}^N |\Psi_j|^2 = 1 \quad (3.32)$$

où $\Psi_j = \Psi_N(x_j)$. La taille et l'espacement du réseau choisi dans l'espace des coordonnées déterminent la taille du réseau réciproque dans l'espace des moments. La longueur totale de l'espace des coordonnées couvert par le réseau vaut Nh . Cette longueur détermine la plus grande longueur d'onde, et donc la plus petite fréquence, qui apparaît dans l'espace des moments

$$\Delta k = \frac{2\pi}{Nh}. \quad (3.33)$$

Cette relation nous fournit l'espacement du réseau dans l'espace des moments. Le point central de ce réseau est pris en $k = 0$, et les points sont distribués symétriquement autour de zéro. L'analogue discret du hamiltonien (3.30) s'écrit finalement

$$H_{ij} = \frac{2}{N} \sum_{l=1}^{(N-1)/2} \cos\left(l2\pi\frac{i-j}{N}\right) T_l + V(x_i)\delta_{ij} \quad (3.34)$$

avec le facteur

$$T_l = \left(\frac{2\pi l}{Nh}\right)^2. \quad (3.35)$$

En fait la somme dans le terme cinétique peut être effectuée, et conduit, comme dans le cas du réseau de Lagrange à pas constant (section 2.7.1), à une expression compacte pour le terme T_{ij}

$$T_{ii} = \frac{\pi^2}{3h^2} \frac{N^2 - 1}{N^2}, \quad (3.36)$$

et

$$T_{ij} = (-)^{i+j} \frac{2\pi^2}{N^2 h^2} \frac{\cos \frac{\pi(i-j)}{N}}{\sin^2 \frac{\pi(i-j)}{N}} \quad (3.37)$$

pour $i \neq j$. Les solutions de l'équation de Schrödinger sont obtenues par la résolution du système d'équation

$$\sum_{j=1}^N (H_{ij} - E\delta_{ij})\Psi_j = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (3.38)$$

qui fournit l'énergie E et les coefficients Ψ_j qui sont directement les valeurs de la fonction d'onde aux points x_j du réseau. La méthode du réseau de Fourier a un avantage numérique : le passage entre les deux représentations $|x\rangle$ et $|k\rangle$ peut être effectué à l'aide de l'algorithme FFT (Fast Fourier Transform) [Nus82]. Etant donnée sa simplicité, cette méthode est fort utilisée. Par exemple, Chu [Chu90], et Yao et Chu [YC92] couplent la méthode du réseau de Fourier avec la méthode de la rotation complexe pour étudier des états de résonance. Layton et Stade [LS93] et Layton [Lay93] l'utilisent avec la méthode de la matrice R pour déterminer les déphasages, et développent un nouveau type de transformation de Fourier discrète : la transformation de Fourier-Riccati-Bessel discrète. Fattal, Baer et Kosloff [FBK96] généralisent la méthode du réseau de Fourier en introduisant une transformation des coordonnées permettant de modifier la répartition des points du réseau, ceux-ci n'étant plus nécessairement uniformément répartis. Ils appliquent en particulier leur nouvelle technique au problème coulombien.

Cette méthode se démarque de la méthode DVR [LHL85] en ce qui concerne le traitement du terme cinétique. Ce dernier est en effet calculé à l'aide de l'algorithme FFT plutôt qu'en utilisant la base de fonctions (3.27) et une matrice de transformation pour se ramener à la représentation dans laquelle la matrice potentielle est diagonale. L'algorithme FFT étant performant, cette procédure constitue un avantage dans certaines applications, tels que les problèmes semi-relativistes [BS98], dans lesquels le terme cinétique prend une forme compliquée. Par contre, dans le cas de l'équation de Schrödinger, la construction et l'utilisation des fonctions de Lagrange associées au réseau élimine l'intérêt de cette procédure. En effet, avec ces fonctions il est possible d'obtenir directement une expression compacte simple pour le terme cinétique sans utiliser de transformation correspondant à un changement de base [Sem00]. Les expressions (3.36) et (3.37) en sont un exemple. D'autre part, étant donnée sa formulation, la méthode du réseau de Fourier fournit une estimation de la fonction d'onde uniquement aux points du réseau, contrairement à la méthode des réseaux de Lagrange.

3.3.3 Méthode DSC

En 1999, Wei [Wei99] introduit un algorithme de convolution singulière discrète (DSC : Discrete Singular Convolution) pour résoudre l'équation de Fokker-Planck. Cette méthode est basée sur la théorie des distributions. La

fonction d'essai (3.7) est dans ce cas écrite sous la forme d'une convolution discrète

$$\Psi_N(x) = \sum_{k=1}^N T_\alpha(x - x_k) \Psi(x_k) \quad (3.39)$$

où T_α représente une approximation d'une distribution singulière T ($T_\alpha \xrightarrow{\alpha \rightarrow \alpha_0} T$). Les points x_k sont tels que l'expression (3.39) est bien définie. En pratique pour résoudre une équation différentielle telle que l'équation de Schrödinger, la distribution de Dirac $\delta(x)$ est utilisée, et l'approximation T_α correspond alors à une séquence delta $\delta_\alpha(x)$ [Wei00]. Citons par exemple la séquence de Shannon qui s'écrit

$$\delta_\alpha(x - x_k) = \frac{\sin \alpha(x - x_k)}{\pi(x - x_k)} \quad (3.40)$$

et celle de Dirichlet

$$\delta_\alpha(x - x_k) = \frac{\sin \alpha(x - x_k)}{(2M + 1) \sin \alpha\left(\frac{x - x_k}{2M + 1}\right)} \quad (3.41)$$

où x_k est un point de réseau et M est un paramètre. Toutes deux tendent vers $\delta(x - x_k)$ pour α tendant vers l'infini. Le paramètre α est choisi dans ces cas égal à la fréquence de Nyquist $\alpha = \frac{\pi}{h}$, où h est l'écart entre deux points x_k , ceux-ci étant pris uniformément répartis sur l'intervalle. Ce choix identifie le meilleur échantillonnage de la fonction d'onde Ψ recherchée. Wei ne remarque cependant pas que les points x_k ainsi choisis correspondent aux zéros de ses fonctions $\delta_\alpha(x)$. Les fonctions (3.40) sont en fait identiques aux fonctions d'interpolation développées par Schwartz [Sch85] à partir de la fonction sinus. Les fonctions (3.41) du noyau de Dirichlet sont quant à elles équivalentes aux fonctions de Lagrange du réseau à pas constant défini au chapitre 2. Avec la technique de collocation (3.11) aux points x_k et les fonctions $\delta_\alpha(x)$, nous obtenons le système d'équations

$$\sum_{j=1}^N \left\{ - \left[\frac{d^2}{dx^2} \delta_\alpha(x - x_j) \right]_{x=x_i} + (V(x_i) - E) \delta_{ij} \right\} c_j = 0 \quad (3.42)$$

en utilisant la propriété de l'approximation $\delta_\alpha(x_i - x_j)$ de la distribution de Dirac qui conduit au facteur δ_{ij} dans le terme potentiel. La matrice potentielle est alors diagonale, et obtenue uniquement à partir du potentiel évalué aux points x_i . Cette méthode DSC est semblable à la méthode des réseaux de Lagrange comme le montre la comparaison de l'équation (3.42) avec la forme typique des réseaux de Lagrange (3.9). Bien que Wei obtient les équations (3.42) sans faire appel à une règle de quadrature, l'utilisation de la règle de quadrature associée au réseau à pas constant, et caractérisée par des poids égaux, conduit exactement aux mêmes équations.

3.4 Conclusions

La méthode des réseaux de Lagrange est une méthode globale située à l'intersection des méthodes de Galerkin et de collocation. Elle constitue également

un sous-ensemble de la méthode DVR, pour lequel la précision est améliorée. A ce titre elle peut être reliée à d'autres méthodes basées sur un réseau de points telles que la méthode du réseau de Fourier ou la méthode DSC. En particulier nous avons montré que ces deux méthodes conduisent à des systèmes d'équations équivalents à celui de la méthode des réseaux de Lagrange (équations (3.8), (3.38) et (3.42)).

Chapitre 4

Etats liés d'un système à deux corps

4.1 Introduction

Dans ce chapitre la méthode des réseaux de Lagrange est mise en œuvre sur un exemple simple. Ceci permet d'illustrer dans un cas pratique les principes de la méthode qui ont été décrits au chapitre 2. Nous choisissons comme exemple la recherche d'états liés d'un système à deux corps, de masses m_1 et m_2 , dont l'interaction est caractérisée par le potentiel $V(r)$, où r est la distance entre les deux corps. Dans le cas de l'équation de Schrödinger, l'élimination du mouvement du centre de masse nous ramène au problème d'une particule fictive, de masse $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$, plongée dans un champ central déterminé par le potentiel $V(r)$. Nous pouvons alors décomposer la fonction d'onde Ψ selon

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_l^m(\Omega) \quad (4.1)$$

où $u(r)$ est la fonction d'onde radiale ($r \in [0, \infty[$), Y_l^m est une harmonique sphérique dépendant des coordonnées angulaires Ω du vecteur \mathbf{r} , et l est le moment cinétique orbital relatif. La partie radiale de l'équation de Schrödinger stationnaire correspondante s'écrit dans ce cas

$$\left(-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_{eff}(r) \right) u(r) = E u(r) \quad (4.2)$$

où E est l'énergie. Dans (4.2) nous avons fait le choix $\hbar = 1$. Le potentiel effectif $V_{eff}(r)$ est la somme du potentiel $V(r)$ et du terme centrifuge dépendant du moment cinétique orbital l

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{1}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (4.3)$$

La fonction d'onde $u(r)$ doit en outre vérifier les conditions aux limites, c'est-à-dire qu'elle doit s'annuler à l'origine, $u(0) = 0$, et à l'infini, $u(\infty) = 0$. Le terme d'énergie centrifuge fait de l'origine $r = 0$ un point singulier régulier, ce qui impose le comportement à l'origine de la fonction d'onde $u(r)$. Celle-ci doit tendre vers zéro comme r^{l+1} dans le cas d'un moment cinétique orbital l .

L'équation (4.2) est l'exemple idéal pour tester une nouvelle méthode de résolution. En effet, pour certains potentiels $V(r)$, des solutions exactes peuvent être déterminées analytiquement, et permettent ainsi une étude de la précision de la méthode de résolution. De plus, la présence du terme centrifuge en $1/r^2$ lorsque l est différent de zéro, pose le problème des singularités dans le potentiel effectif, et nous permet de tester la validité de la technique de régularisation introduite au chapitre 2.

Dans la suite, trois potentiels sont considérés : le potentiel de Morse, le potentiel d'oscillateur harmonique (à trois dimensions) et le potentiel coulombien. Nous avons choisi ces trois potentiels car ils sont représentatifs des différents potentiels rencontrés en pratique. Le potentiel de Morse [Flü71] est un potentiel non confinant et non singulier. Il est exactement soluble pour $l = 0$ mais uniquement sur l'intervalle $] -\infty, \infty[$. Ce potentiel est fort utilisé notamment en physique moléculaire pour étudier le mouvement vibratoire des molécules diatomiques. Le potentiel d'oscillateur harmonique est également non singulier mais est par contre confinant. Cette dernière propriété implique que son spectre d'énergie est purement discret. Ce potentiel peut par exemple servir d'approximation pour étudier le mouvement vibratoire de molécules diatomiques autour de leur position d'équilibre. Le potentiel coulombien est quant à lui non confinant mais singulier. Il est très important puisqu'il apparaît systématiquement lors de l'étude de systèmes contenant des particules chargées. Le potentiel d'oscillateur harmonique et le potentiel coulombien sont analytiquement solubles pour toute valeur de l .

Nous utilisons donc ces trois potentiels pour comparer d'une part la méthode des réseaux de Lagrange à la méthode variationnelle, et d'autre part quelques calculs sur réseaux entre eux [Bay95, BV99]. Ces comparaisons portent non seulement sur les énergies des états liés mais également sur les fonctions d'onde associées puisque la méthode des réseaux de Lagrange en fournit une estimation.

Bien que dans ce travail nous nous consacrons au cas de l'équation de Schrödinger, la méthode des réseaux de Lagrange n'est pas limitée à ce problème. Elle peut en effet être utilisée pour résoudre d'autres équations différentielles, tout en conservant sa simplicité et sa précision [SBHS01]. A titre d'illustration, nous présentons à la dernière section de ce chapitre le problème de l'étude d'états liés pour un système à deux corps avec une dynamique semi-relativiste. L'équation à résoudre est celle de Salpeter sans spin [JOS86], qui est une généralisation relativiste de l'équation de Schrödinger.

4.2 Définition et solutions analytiques des potentiels

4.2.1 Potentiel de Morse

Le potentiel de Morse [Flü71] est défini par

$$V(r) = D \left(e^{-2a(r-r_e)} - 2e^{-a(r-r_e)} \right). \quad (4.4)$$

Ce potentiel présente un puits attractif centré en r_e dont la profondeur est égale à D . Il est également caractérisé par une forte répulsion à l'origine. Pour les applications numériques nous choisissons les paramètres du potentiel permettant d'étudier les niveaux de vibrations de l'ion moléculaire H_2^+ [Bay95], c'est-à-dire

$$\begin{aligned} D &= 0.10262 \\ r_e &= 2 \\ a &= 0.72 \end{aligned} \quad (4.5)$$

exprimés dans les unités atomiques. La masse m est dans ce cas égale à 918.

Le potentiel effectif V_{eff} associé au potentiel de Morse correspondant à ces valeurs des paramètres est représenté à la figure 4.1 pour $l = 0$ et $l = 1$. Nous

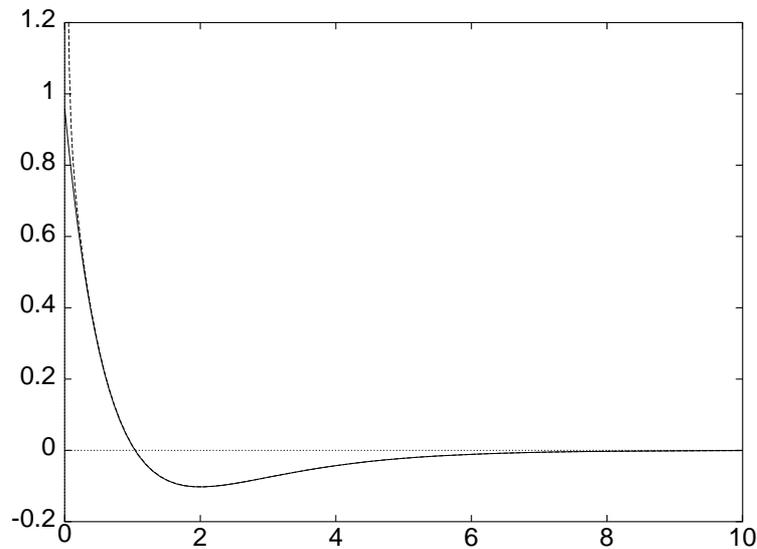


FIG. 4.1 – Potentiel effectif associé au potentiel de Morse pour l'ion moléculaire H_2^+ . Le trait plein correspond au cas $l = 0$, et les traits espacés au cas $l = 1$.

constatons que les potentiels effectifs avec $l = 0$ et $l = 1$ ne diffèrent qu'aux très courtes distances. Ceci signifie que la répulsion du potentiel de Morse près de l'origine est plus importante que la répulsion induite par le terme centrifuge lorsque $l = 1$. Les effets de ce dernier sont donc fortement atténués dans le cas du potentiel de Morse.

Lorsque le moment cinétique l est nul, l'équation (4.2) avec le potentiel (4.4) est soluble analytiquement, mais uniquement sur l'intervalle $] -\infty, \infty[$. Cependant, comme nous allons le voir, ces solutions constituent une bonne approximation des solutions du problème défini sur $[0, \infty[$, pour des valeurs des paramètres du potentiel rencontrées en pratique.

Sur $] -\infty, \infty[$, l'équation (4.2) admet pour $l = 0$ les solutions [Flü71]

$$u_{n_r,0}(r) = \Psi_{n_r}(y) = A_{n_r} y^{\frac{\gamma}{ar_e} - (n_r + 1/2)} e^{-\frac{1}{2}y} {}_1F_1(-n_r, \frac{2\gamma}{ar_e} - 2n_r, y) \quad (4.6)$$

où n_r est le nombre quantique de nœuds radiaux, ${}_1F_1$ la fonction hypergéométrique confluyente, et

$$y = \frac{2\gamma}{ar_e} e^{-a(r-r_e)} \quad (4.7)$$

$$\gamma^2 = 2mDr_e^2. \quad (4.8)$$

Le facteur de normalisation A_{n_r} est tel que

$$\frac{1}{ar_e} \int_0^\infty dy y^{-1} |\Psi_{n_r}(y)|^2 = 1. \quad (4.9)$$

Les énergies associées aux états (4.6) sont données par

$$E_{n_r} = -D + a\sqrt{\frac{2D}{m}}(n_r + 1/2) - \frac{a^2}{2m}(n_r + 1/2)^2. \quad (4.10)$$

Le nombre quantique n_r est borné par $\frac{1}{2}(1 - \frac{2\gamma}{ar_e})$ puisque l'énergie E vérifie $-D < E < 0$. L'ion H_2^+ par exemple n'admet que 19 états vibrationnels ($n_r = 0, \dots, 18$).

Il nous reste à vérifier que ces formules sont encore valables, au moins approximativement, lorsque nous nous intéressons au problème radial sur l'intervalle $[0, \infty[$. Pour cela nous devons analyser le comportement de la fonction d'onde (4.6) à l'origine $r = 0$, ou encore en $y = y_0 = \frac{2\gamma}{ar_e} e^{ar_e}$. Dans le cas de l'ion moléculaire H_2^+ , y_0 vaut environ 161, et la fonction d'onde (4.6) en y_0 varie entre $2 \cdot 10^{-15}$ et $7 \cdot 10^{-12}$ selon l'état n_r considéré. Ces valeurs étant proches de zéro, nous en déduisons que les formules (4.6) et (4.10) constituent de bonnes approximations des fonctions d'onde et des énergies pour le problème (4.2) avec le potentiel de Morse (4.4) sur le demi-espace $[0, \infty[$. En effet, il est facile de démontrer que lorsque l'erreur sur la fonction d'onde est de l'ordre de ε , l'erreur sur l'énergie est de l'ordre de ε^2 . Ceci nous indique que l'erreur faite en utilisant (4.10) est inférieure à la précision de la machine dans les applications numériques.

4.2.2 Potentiel d'oscillateur harmonique à trois dimensions

Le potentiel d'oscillateur harmonique à trois dimensions est défini par

$$V(r) = \frac{r^2}{2} \quad (4.11)$$

en choisissant une masse $m = 1$.

Contrairement au cas du potentiel de Morse, l'équation de Schrödinger (4.2) avec le potentiel (4.11) est soluble analytiquement pour toute valeur du moment cinétique l [Flü71]. Le spectre, purement discret, s'écrit

$$E_n = n + \frac{3}{2} \quad (4.12)$$

avec le nombre quantique principal n égal à

$$n = 2n_r + l \quad (4.13)$$

où n_r est toujours le nombre quantique radial. Les niveaux d'énergie commencent donc par une énergie du point zéro de $3/2$ correspondant aux trois

degrés de liberté du problème, et sont équidistants avec un espacement de 1. Les fonctions d'onde correspondantes s'écrivent quant à elles sous la forme

$$u_{n_r, l}(r) = C_{n_r, l} r^{l+1} e^{-r^2/2} {}_1F_1(-n_r, l + \frac{3}{2}; r^2) \quad (4.14)$$

où $C_{n_r, l}$ est un coefficient de normalisation, et ${}_1F_1$ est la fonction hypergéométrique confluyente.

4.2.3 Potentiel coulombien

Le potentiel coulombien est défini par

$$V(r) = -\frac{1}{r} \quad (4.15)$$

dans les unités atomiques, avec $m = 1$.

Les solutions de l'équation (4.2) avec ce potentiel sont bien connues. Les énergies des états liés s'écrivent [Flü71]

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \quad (4.16)$$

avec le nombre quantique principal n défini par

$$n = n_r + l + 1 \quad (4.17)$$

où n_r est le nombre quantique de nœuds radiaux.

Les fonctions d'onde associées aux états (4.16) s'écrivent

$$u_{n_r, l}(r) = C_{n_r, l} r^{l+1} e^{-r/n} {}_1F_1(-n_r, 2l + 2; \frac{2r}{n}) \quad (4.18)$$

où $C_{n_r, l}$ est une constante de normalisation. Il faut noter que ces fonctions d'onde décroissent très lentement lorsque r tend vers l'infini à cause du facteur $1/n$, provenant de la formule des énergies, dans l'exponentielle.

4.3 Calculs variationnels et sur réseaux de Lagrange

Dans cette section nous comparons les résultats obtenus avec quelques réseaux de Lagrange avec ceux de calculs variationnels utilisant une base de fonctions équivalente à celle des fonctions de Lagrange.

Parmi les réseaux de Lagrange développés au chapitre 2, nous considérons le réseau à pas constant (2.76), le réseau de Laguerre (2.106) et le réseau de gaussiennes (section 2.7.4). Le réseau à pas constant n'étant défini que sur l'intervalle $[0, 1]$, il convient d'utiliser un facteur d'échelle h pour étendre le réseau sur l'intervalle $[0, h]$. Afin que la troncature du domaine $[0, \infty[$ soit valable, c'est-à-dire que l'erreur correspondante soit négligeable, il est nécessaire

de choisir le facteur d'échelle de telle sorte que l'extrémité h de l'intervalle se situe dans la zone asymptotique de la fonction d'onde de l'état étudié. La valeur de h dépend ainsi du niveau auquel nous nous intéressons. Dans les exemples numériques il est toujours choisi de telle sorte que l'erreur due à la troncature soit inférieure aux autres erreurs (numériques et liées à l'approximation de Gauss).

Dans les cas des réseaux de Laguerre et de gaussiennes, les points du réseau appartiennent déjà à l'intervalle $[0, \infty[$, ce qui élimine tout problème de troncature. Le facteur d'échelle h a uniquement pour rôle de changer la répartition des points du réseau sur l'intervalle $[0, \infty[$, et de permettre ainsi une meilleure représentation du potentiel d'interaction $V(r)$ dans le schéma de discrétisation sur le réseau (2.64).

Les différents éléments nécessaires à la mise en œuvre de ces réseaux, tels que les points du réseau et les éléments de matrice T_{ij} de l'énergie cinétique, ont été développés au chapitre 2. Pour le réseau à pas constant, les points sont définis par (2.76), et les éléments T_{ij} par (2.87) et (2.89). Le réseau basé sur des gaussiennes est construit comme décrit à la section 2.7.4, et les éléments de matrice T_{ij} sont calculés numériquement à partir de (2.6).

Le réseau de Laguerre ne peut pas quant à lui être employé tel quel pour résoudre (4.2), car les fonctions de Lagrange-Laguerre ne s'annulent pas à l'origine (figure 2.7). Cependant, nous pouvons rétablir cette condition aux limites en utilisant les fonctions de Lagrange-Laguerre régularisées (2.122). Cette technique à l'avantage de régler en même temps le problème de la singularité dans (4.2) lorsque l est différent de zéro. Les éléments de matrice T_{ij} sont alors (2.127) et (2.128) si nous les évaluons à l'approximation de Gauss.

Examinons maintenant les trois calculs variationnels servant de points de comparaison pour chacun des trois réseaux de Lagrange utilisés. La base des fonctions de Lagrange f_i (2.71) du réseau à pas constant est équivalente à celle des fonctions sinusoïdales (2.65). Pour simplifier les calculs d'éléments de matrice nous choisissons ces dernières fonctions comme fonctions de base de notre premier calcul variationnel. Elles sont explicitement données par

$$\varphi_i(x) = \sqrt{2} \sin(\pi i x) \quad (4.19)$$

avec $i = 1, \dots, N$. Notre deuxième calcul variationnel est basé sur les fonctions

$$\varphi_i(x) = x L_i(x) e^{-x/2} \quad (4.20)$$

avec $i = 1, \dots, N$, et où L_i est le polynôme de Laguerre de degré i . Cette base de fonctions φ_i est équivalente à celle des fonctions de Lagrange-Laguerre régularisées (2.122) et (2.109). Enfin au calcul sur réseau de gaussiennes nous associons un calcul variationnel sur la base des gaussiennes décentrées (2.115), équivalente à la base des fonctions de Lagrange du réseau de gaussiennes. Les fonctions de base de notre troisième calcul variationnel s'écrivent donc

$$\varphi_i(x) = e^{-(x-ak)^2/2} - e^{-(x+ak)^2/2} \quad (4.21)$$

avec $k = \frac{2i-1}{2}$, et $i = 1, \dots, N$.

En comparant la base des fonctions φ_i avec la base équivalente constituée des fonctions de Lagrange, nous pouvons déduire une caractéristique des calculs sur réseaux de Lagrange. Dans le cas des fonctions φ_i , augmenter la taille de la base de N à $N+1$ revient à ajouter la fonction φ_{N+1} à la base des N fonctions φ_i ($i = 1, \dots, N$). Par contre, dans le cas de la base des fonctions de Lagrange, lorsque la taille de la base est augmentée, toutes les fonctions de Lagrange f_i sont modifiées. En effet, la position des N points du réseau de Lagrange dépend de la valeur de N (par exemple, dans le cas des réseaux basés sur les polynômes orthogonaux, il s'agit des zéros du polynôme de degré N), et il en est de même pour les fonctions de Lagrange associées. Changer la valeur de N revient ainsi à choisir d'autres fonctions de base pour le calcul.

Avec les trois calculs sur réseau de Lagrange et les trois calculs variationnels définis ci-dessus, nous étudions tout d'abord les énergies d'états liés dans les cas des potentiels de Morse et d'oscillateur harmonique, et ensuite nous examinons les fonctions d'onde associées à ces états.

4.3.1 Énergies d'états liés

Potentiel de Morse

Nous considérons le potentiel de Morse (4.4) avec les paramètres (4.5) correspondant au cas de l'ion moléculaire H_2^+ . Nous nous intéressons aux états liés correspondant à un moment cinétique $l = 0$ et $l = 1$, et plus particulièrement aux états $n_r = 0, 5$ et 10 . Les énergies de référence de ces états sont donné au tableau 4.1. Lorsque $l = 0$ elles sont déterminées à l'aide de la formule (4.10).

TAB. 4.1 – Énergies des états $n_r = 0, 5$ et 10 du potentiel de Morse de paramètres (4.5) lorsque le moment cinétique l est égal à 0 et 1.

	$l = 0$	$l = 1$
$n_r = 0$	-0.097 307 739 656 379	-0.097 040 301 141 149
$n_r = 5$	-0.051 949 842 102 521	-0.051 735 382 273 816
$n_r = 10$	-0.020 709 591 607 487	-0.020 560 050 459 599

N'ayant pas d'expression exacte pour les énergies pour $l = 1$, nous avons déterminé celles-ci numériquement par différentes méthodes afin de s'assurer de leur convergence sur toutes les décimales indiquées dans le tableau 4.1.

Les erreurs obtenues par rapport aux énergies exactes (4.10) par les six calculs définis précédemment sont repris dans le tableau 4.2 lorsque l est égal à zéro. Chaque calcul sur réseau de Lagrange est regroupé avec le calcul variationnel sur la base équivalente à celle des fonctions de Lagrange. Les trois groupes ainsi formés sont identifiés par des lettres : L pour Laguerre, PC pour pas constant, et G pour gaussienne. Le petit r dans la notation (Lr) fait référence à l'emploi de fonctions régularisées.

La comparaison de chacun des calculs sur réseau de Lagrange avec le calcul variationnel associé nous indique que la méthode des réseaux de Lagrange

TAB. 4.2 – Erreurs absolues sur les niveaux de vibration $n_r = 0, 5$ et 10 de l'ion moléculaire H_2^+ représenté par un potentiel de Morse dans le cas $l = 0$. La première colonne identifie la méthode de calcul (voir texte).

Calcul	N	a	h	$\varepsilon(n_r = 0)$	$\varepsilon(n_r = 5)$	$\varepsilon(n_r = 10)$
(PC) Variationnel	20		4	$5 \cdot 10^{-12}$	$2 \cdot 10^{-4}$	/
	40		6	$< 10^{-15}$	$3 \cdot 10^{-13}$	$4 \cdot 10^{-6}$
	60		8	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$	$7 \cdot 10^{-14}$
(PC) Réseau	20		4	$3 \cdot 10^{-12}$	$2 \cdot 10^{-4}$	/
	40		6	$< 10^{-15}$	$5 \cdot 10^{-13}$	$4 \cdot 10^{-6}$
	60		8	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$	-10^{-13}
(Lr) Variationnel	20		0.05	$4 \cdot 10^{-7}$	$4 \cdot 10^{-3}$	/
	40		0.04	$< 10^{-15}$	$3 \cdot 10^{-11}$	$5 \cdot 10^{-8}$
	60		0.04	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$
(Lr) Réseau	20		0.05	$4 \cdot 10^{-7}$	10^{-3}	/
	40		0.04	$< 10^{-15}$	$-2 \cdot 10^{-10}$	$-3 \cdot 10^{-7}$
	60		0.04	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$
(G) Variationnel	20	0.5	0.4	$-5 \cdot 10^{-11}$	$-2 \cdot 10^{-6}$	$7 \cdot 10^{-4}$
	40	0.5	0.4	$-9 \cdot 10^{-11}$	$-5 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-4}$
(G) Réseau	20	0.4	0.4	-10^{-12}	$7 \cdot 10^{-9}$	$6 \cdot 10^{-3}$
	40	0.3	0.4	$2 \cdot 10^{-14}$	$-2 \cdot 10^{-14}$	$5 \cdot 10^{-9}$
	60	0.3	0.4	$3 \cdot 10^{-14}$	$5 \cdot 10^{-14}$	$-2 \cdot 10^{-14}$

fournit une erreur sur les énergies du même ordre que celle du calcul variationnel. L'utilisation de l'approximation de Gauss dans les calculs d'éléments de matrice, seule différence par rapport à un calcul variationnel classique, ne semble donc pas réduire de manière significative la précision des résultats. Cette propriété est d'autant plus étonnante que l'erreur ainsi introduite sur les éléments de matrice n'est pas du tout négligeable. En effet, nous pouvons estimer l'erreur moyenne sur la matrice potentielle due à l'approximation de Gauss à partir des expressions exactes de ses éléments utilisés dans le calcul variationnel. A titre d'exemple, cette erreur est de l'ordre de 10^{-3} dans les cas des réseaux à pas constant et de Laguerre, alors que les erreurs résultantes sur l'énergie des 11 premiers niveaux est meilleure que 10^{-13} pour le réseau à pas constant (*PC*), et que 10^{-15} pour le réseau de Laguerre (*Lr*) lorsque $N = 60$.

Remarquons aussi que, contrairement au calcul variationnel, les erreurs obtenues avec le réseau de Lagrange peuvent être négatives. Les approximations des énergies ainsi déterminées ne représentent pas nécessairement une borne supérieure de l'énergie exacte. Ceci nous indique qu'en utilisant l'approximation de Gauss nous perdons le caractère variationnel de la méthode. C'est pour cette raison que nous identifions le calcul sur réseau de Lagrange à un calcul variationnel *approché*. Ceci implique également que nous ne pouvons pas déterminer la meilleure estimation de l'énergie de l'état étudié en recherchant le minimum en fonction du facteur d'échelle h . La procédure utilisée en pratique consiste à analyser la stabilité des résultats par rapport à de petites variations de h . En effet les résultats présentent en fonction de h un palier dont la largeur augmente avec le nombre de points du réseau, ou autrement dit avec le nombre de fonctions de base du calcul.

Dans les trois cas le calcul sur réseau de Lagrange a l'avantage de la simplicité puisqu'il ne nécessite aucun calcul analytique des éléments de matrice du potentiel. Dans les calculs variationnels ce dernier point peut représenter une grande partie de la résolution du problème (4.2) en termes de travail et de temps de calcul.

Le calcul sur réseau de Laguerre présente un avantage supplémentaire par rapport au calcul variationnel exact. En effet les fonctions de Lagrange-Laguerre régularisées n'étant pas orthogonales le problème variationnel prend la forme d'un problème généralisé. Par contre dans le calcul sur réseau de Lagrange nous utilisons l'orthonormalité à l'approximation de Gauss de ces mêmes fonctions, ce qui simplifie fortement le problème.

Dans le calcul sur réseau de Laguerre (*Lr*) nous avons utilisé les éléments de matrice de l'énergie cinétique T_{ij} évalués à l'approximation de Gauss. L'utilisation des formules exactes (2.125) et (2.126) fournit des résultats similaires à ceux indiqués dans le tableau 4.2. Ceci provient probablement de la forme particulière de l'erreur (2.129) introduite dans les éléments de matrice d'énergie cinétique en utilisant l'approximation de Gauss. En pratique, dans le cas du réseau de Laguerre (*Lr*), nous appliquons donc l'approximation de Gauss à la fois sur le terme d'énergie potentielle et sur le terme d'énergie cinétique. Il faut noter que cette approximation sur la matrice cinétique ne convient pas en règle générale. Elle peut en particulier se révéler très mauvaise dans le cas de réseaux obtenus à l'aide d'une transformation $u = t(x)$ (voir la section 2.4).

Dans le cas des calculs (G) effectués à l'aide de gaussiennes, le paramètre a apparaissant dans les fonctions de base des deux calculs est optimisé pour fournir une erreur minimale sur les énergies des trois niveaux étudiés. Il s'agit ici d'une optimisation grossière, les résultats n'étant pas sensibles à de très petites variations de a .

Du fait de la non-orthogonalité des fonctions (2.115), le calcul variationnel est limité dans le choix de ce paramètre a et dans la taille N de la base. Effectivement lorsque nous augmentons N ou diminuons a les fonctions (2.115) deviennent redondantes, ce qui limite la précision des résultats. Ces derniers restent cependant précis pour les premiers niveaux, mais nous ne pouvons pas reproduire les énergies des états fortement excités, tel que l'état $n_r = 10$.

Ces problèmes ne se posent évidemment pas dans le cas du réseau de gaussiennes puisque les fonctions de Lagrange correspondantes sont orthogonales. Il est donc possible de choisir une meilleure valeur pour le paramètre a et de plus grandes tailles N de base. Ceci nous permet d'améliorer la précision des résultats par rapport au calcul variationnel avec la base de gaussiennes, et d'étudier des niveaux plus excités.

Nous constatons cependant que la précision sur les premiers niveaux n'est pas améliorée lorsque le nombre N de points du réseau augmente de 40 à 60, mais reste limitée à 10^{-14} . Cette précision est évidemment très bonne et largement suffisante pour les applications pratiques. Cette limitation est due aux erreurs numériques, et en particulier celles affectant les points du réseau qui sont dans ce cas-ci les zéros de polynômes orthogonaux non classiques. Ceux-ci sont déterminés par la technique standard [Gau94] développée à l'annexe A, qui requiert la détermination des coefficients de la relation de récurrence des polynômes non classiques. Ces coefficients sont calculés numériquement via les formules (A.16) et (A.17). Par contre dans le cas des réseaux basés sur les polynômes orthogonaux classiques, tel que le réseau de Laguerre, nous utilisons la bibliothèque NAG, qui fournit une bonne précision sur les zéros de ces polynômes pour des valeurs de N allant jusqu'à 100.

Au tableau 4.3 sont tabulées les erreurs obtenues sur les niveaux $n_r = 0, 5$ et 10 dans le cas d'un moment cinétique $l = 1$. Ces erreurs sont calculées par rapport aux valeurs indiquées au tableau 4.1. Dans ce cas-ci nous ne considérons que les calculs basés sur les fonctions sinusoïdales (PC) et sur les fonctions de Lagrange-Laguerre régularisées (Lr). Nous ne présentons pas le calcul sur base de gaussiennes car les éléments de matrice du terme centrifuge dans le calcul variationnel sont difficiles à évaluer. Ils requièrent une intégration numérique qui nécessite un grand nombre de points, ce qui allonge fortement le temps de calcul du cas variationnel par rapport au calcul sur réseau. Ceci illustre un avantage de la méthode des réseaux de Lagrange puisque le terme centrifuge y est évalué simplement à l'approximation de Gauss. Les résultats pour le réseau de gaussiennes lorsque l est différent de zéro sont discutés lors de la comparaison de quelques calculs sur réseau.

Les résultats obtenus aux lignes (PC) et (Lr) pour $l = 1$ sont aussi bons que dans le cas $l = 0$, et nous indiquent à nouveau que, malgré l'utilisation de l'approximation de Gauss, la méthode des réseaux de Lagrange est aussi précise qu'un calcul variationnel équivalent. Le potentiel de Morse ne repré-

TAB. 4.3 – Erreurs absolues sur les niveaux de vibration $n_r = 0, 5$ et 10 de l'ion moléculaire H_2^+ représenté par un potentiel de Morse dans le cas $l = 1$.

Calcul	N	a	h	$\varepsilon(n_r = 0)$	$\varepsilon(n_r = 5)$	$\varepsilon(n_r = 10)$
<i>(PC)</i> Variationnel	20		5	10^{-9}	$2 \cdot 10^{-5}$	/
	40		6	$< 10^{-15}$	$-2 \cdot 10^{-13}$	$4 \cdot 10^{-6}$
	60		8	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$	$7 \cdot 10^{-14}$
<i>(PC)</i> Réseau	20		5	$-3 \cdot 10^{-9}$	10^{-5}	/
	40		6	$< 10^{-15}$	$5 \cdot 10^{-13}$	$4 \cdot 10^{-6}$
	60		8	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$	-10^{-13}
<i>(Lr)</i> Variationnel	20		0.05	$4 \cdot 10^{-7}$	/	/
	40		0.04	$< 10^{-15}$	$3 \cdot 10^{-11}$	$5 \cdot 10^{-8}$
	60		0.04	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$
<i>(Lr)</i> Réseau	20		0.05	$5 \cdot 10^{-7}$	/	/
	40		0.04	$< 10^{-15}$	$-2 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{-8}$
	60		0.04	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$

sente cependant pas un bon exemple pour analyser l'effet de singularités dans le potentiel effectif (4.3). En effet, comme l'indique clairement la figure 4.1, la répulsion du potentiel de Morse près de l'origine masque le terme centrifuge jusqu'à de très petites distances pour $l = 1$. Les effets de ce dernier sont donc fortement atténués, et le comportement de la fonction d'onde des états liés pour $l = 1$ aux courtes distances est principalement contraint par le potentiel de Morse.

Potentiel d'oscillateur harmonique à trois dimensions

Dans le cas du potentiel d'oscillateur harmonique nous nous intéressons également aux niveaux d'énergie correspondant à $n_r = 0, 5$ et 10 dans les cas du moment cinétique valant 0 et 1 . Les valeurs de ces énergies sont données exactement par les formules (4.12) et (4.13).

Au tableau 4.4 nous avons indiqué les erreurs obtenues sur les énergies des états $n_r = 0, 5$ et 10 pour $l = 0$, avec les calculs sur base de fonctions sinus (*PC*) et des fonctions de Lagrange-Laguerre régularisées (*Lr*).

Comme dans le cas du potentiel de Morse, les calculs variationnels et sur réseaux de Lagrange fournissent des précisions similaires, avec tout au plus une différence d'un ordre de grandeur sur les erreurs par rapport aux énergies de référence. Dans les calculs (*PC*) nous atteignons déjà les limites de précision de la machine avec $N = 40$. Les erreurs numériques dues à la précision de la machine ne sont en effet plus négligeables comme nous l'indiquent les valeurs négatives obtenues sur les erreurs dans le calcul variationnel. A titre d'exemple, ces deux calculs (*PC*) effectués avec une précision étendue (équivalent à de la "quadruple" précision) fournissent une erreur sur les énergies des trois niveaux considérés de l'ordre de 10^{-18} avec $N = 40$ points. Le même phénomène se produit dans les calculs (*Lr*) mais seulement pour les états $n_r = 0$ et $n_r = 5$

TAB. 4.4 – Erreurs absolues sur les énergies des niveaux $n_r = 0, 5$ et 10 pour un potentiel d'oscillateur harmonique dans le cas $l = 0$.

Calcul	N	h	$\varepsilon(n_r = 0)$	$\varepsilon(n_r = 5)$	$\varepsilon(n_r = 10)$
(PC) Variationnel	20	8	$< 10^{-15}$	$2 \cdot 10^{-12}$	$6 \cdot 10^{-5}$
	40	12	$-2 \cdot 10^{-15}$	$9 \cdot 10^{-15}$	$-4 \cdot 10^{-14}$
(PC) Réseau	20	8	$-5 \cdot 10^{-15}$	$2 \cdot 10^{-12}$	$6 \cdot 10^{-5}$
	40	12	$< 10^{-15}$	$-2 \cdot 10^{-14}$	$< 10^{-15}$
(Lr) Variationnel	20	0.11	10^{-13}	$8 \cdot 10^{-5}$	/
	40	0.07	$5 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-15}$	$3 \cdot 10^{-8}$
	60	0.09	10^{-14}	$1 \cdot 10^{-14}$	$-2 \cdot 10^{-14}$
(Lr) Réseau	20	0.11	$-3 \cdot 10^{-14}$	$3 \cdot 10^{-4}$	/
	40	0.07	$-2 \cdot 10^{-14}$	$-4 \cdot 10^{-14}$	$6 \cdot 10^{-9}$
	60	0.09	$2 \cdot 10^{-13}$	$2 \cdot 10^{-13}$	10^{-13}

avec $N = 40$, et pour les trois niveaux lorsque N vaut 60. Le point important est qu'il ne faut pas plus de fonctions de base dans la méthode des réseaux de Lagrange que dans le calcul variationnel pour obtenir une précision donnée.

Pour étudier les états liés correspondant à $l = 1$, nous considérons en plus des calculs (PC) et (Lr) précédents, les calculs (PCr) auxquels sont associés des fonctions de base régularisées. Le calcul variationnel (PCr) utilise donc la base formée par les N fonctions

$$\varphi_i(x) = \sqrt{2}x \sin(\pi i x) \quad (4.22)$$

qui sont simplement les fonctions (4.19) multipliée par x . Le calcul sur réseau de Lagrange (PC) est toujours défini par le réseau à pas constant (2.76), mais les fonctions de Lagrange sont cette fois régularisées selon (2.122). Ce nouveau calcul nous permet d'étudier la technique de régularisation sur la singularité introduite lorsque le moment cinétique est différent de zéro.

Les erreurs obtenues par les différents calculs sur les énergies des niveaux $n_r = 0, 5$ et 10 pour $l = 1$ sont reprises au tableau 4.5.

Comme dans les cas précédents la différence entre les résultats des calculs sur réseaux de Lagrange et ceux des calculs variationnels est faible, indiquant une fois de plus la validité de la méthode des réseaux de Lagrange utilisant l'approximation de Gauss.

Comparons maintenant les calculs (PC) et (PCr) , le deuxième différant du premier uniquement par le facteur de régularisation introduit dans les fonctions de base. Les résultats obtenus par les deux méthodes (PC) sont peu précis comparativement aux résultats correspondant à $l = 0$. Ceci n'est pas étonnant puisque les fonctions de base de ces deux calculs, de type sinusoïdal, ne présentent pas le comportement à l'origine en r^2 des états $l = 1$. Les fonctions de base doivent donc se combiner afin de simuler ce comportement, ce qui nécessite des tailles N de base beaucoup plus grandes. En fait le même problème se pose également dans les calculs (Lr) . Cependant les fonctions de

TAB. 4.5 – Erreurs absolues sur les énergies des niveaux $n_r = 0, 5$ et 10 pour un potentiel d'oscillateur harmonique dans le cas $l = 1$.

Calcul	N	h	$\varepsilon(n_r = 0)$	$\varepsilon(n_r = 5)$	$\varepsilon(n_r = 10)$
(PC) Variationnel	20	6	10^{-3}	$2 \cdot 10^{-2}$	/
	40	8	$4 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-3}$	10^{-2}
	60	8	10^{-4}	10^{-3}	$3 \cdot 10^{-3}$
(PC) Réseau	20	6	$-2 \cdot 10^{-3}$	$-3 \cdot 10^{-2}$	/
	40	8	$-7 \cdot 10^{-4}$	$-9 \cdot 10^{-3}$	$-2 \cdot 10^{-2}$
	60	8	$-2 \cdot 10^{-4}$	$-3 \cdot 10^{-3}$	$-6 \cdot 10^{-3}$
(PCr) Variationnel	20	8	$8 \cdot 10^{-15}$	10^{-11}	$2 \cdot 10^{-4}$
	40	11	$2 \cdot 10^{-14}$	$4 \cdot 10^{-13}$	$2 \cdot 10^{-13}$
(PCr) Réseau	20	8	$-7 \cdot 10^{-15}$	10^{-11}	$2 \cdot 10^{-4}$
	40	11	$4 \cdot 10^{-15}$	$9 \cdot 10^{-15}$	$-3 \cdot 10^{-14}$
(Lr) Variationnel	20	0.1	10^{-12}	$6 \cdot 10^{-4}$	/
	40	0.09	$-2 \cdot 10^{-14}$	$-2 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-7}$
	60	0.08	-10^{-14}	$-8 \cdot 10^{-14}$	$3 \cdot 10^{-14}$
(Lr) Réseau	20	0.1	-10^{-12}	$7 \cdot 10^{-4}$	/
	40	0.09	$-2 \cdot 10^{-14}$	$-2 \cdot 10^{-15}$	$2 \cdot 10^{-7}$
	60	0.08	$2 \cdot 10^{-13}$	-10^{-13}	$-3 \cdot 10^{-14}$

base dans ce cas prennent la forme de polynôme en r , et peuvent donc simuler plus facilement le comportement en r^2 en se combinant.

De par la régularisation, les fonctions de base des calculs (PCr) présentent naturellement le bon comportement à l'origine pour les états $l = 1$. Les résultats fournis par les deux méthodes (PCr) lorsque $l = 1$ sont du même ordre de précision que ceux obtenus par les méthodes (PC) lorsque $l = 0$. Cet exemple illustre bien l'importance de la régularisation permettant d'éliminer la singularité du potentiel effectif et d'introduire le bon comportement à l'origine dans les fonctions de base.

Bien évidemment les calculs (PCr) ne conviennent pas pour étudier les états $l = 0$ puisque les fonctions de base, avec un comportement en r^2 à l'origine, ne peuvent en aucun cas représenter une fonction se comportant comme r aux courtes distances. De même elles ne sont pas bien adaptées au traitement des états avec $l \geq 2$, de la même façon que les calculs (PC) ne sont pas adaptés au cas $l = 1$.

Au point de vue des réseaux de Lagrange, cette analyse conduit naturellement à l'idée de réseau dépendant de l [BH86]. Dans le cas du réseau à pas constant, cela revient à multiplier les fonctions de Lagrange (2.71) par un facteur r^l afin d'étudier les états de moment cinétique l , les points du réseau restant toujours les mêmes. De manière plus générale, il est tout à fait possible de construire un réseau de Lagrange dont les points du réseau et les fonctions de Lagrange dépendent de l [BH86]. Ces réseaux peuvent donner de bons résultats mais ils restent néanmoins limités aux applications dans lesquelles il n'existe pas de couplage entre différentes valeurs du moment cinétique l . C'est

pourquoi il est intéressant de rechercher des réseaux indépendants de l permettant d'étudier des états correspondant à différentes valeurs de l . Le réseau de Laguerre (Lr) en est un exemple. Il permet en effet de déterminer avec une bonne précision les énergies de niveaux pour toute valeur de l , pour autant que le nombre N de points de réseau soit choisi suffisamment grand par rapport à l . Ceci provient toujours de la forme particulière des fonctions de Lagrange-Laguerre (équivalentes à des polynômes en r multipliés par une exponentielle), qui peuvent se combiner et reproduire assez facilement le comportement à l'origine en r^{l+1} .

4.3.2 Fonctions d'onde d'états liés

Comme les méthodes variationnelles usuelles, la méthode des réseaux de Lagrange fournit non seulement une estimation des énergies des états liés, mais également une approximation des fonctions d'onde correspondantes. C'est ce dernier point que nous allons à présent analyser.

L'approximation de la fonction d'onde d'un état lié s'écrit dans la base des fonctions de Lagrange sous la forme (2.18)

$$u^{\text{rés}}(r) = \sum_{i=1}^N c_i f_i(r/h) = \sum_{i=1}^N \lambda_i^{1/2} u(hx_i) f_i(r/h) \quad (4.23)$$

où les coefficients variationnels c_i sont obtenus lors de la résolution de (4.2), x_i représente un point du réseau de Lagrange et h est le facteur d'échelle. La deuxième identité découle des conditions de Lagrange (2.1). Les coefficients c_i fournissent donc une estimation directe de la fonction d'onde aux points du réseau. Néanmoins la relation (4.23) définit une approximation de la fonction d'onde sur tout le demi-espace $[0, \infty[$.

Afin de déterminer la validité de la représentation de la fonction d'onde aux points x_i du réseau d'une part, et de l'approximation globale (4.23) d'autre part, nous définissons l'erreur moyenne aux points du réseau ε_r

$$\varepsilon_r^{\text{rés/réf}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |u^{\text{rés}}(hx_i) - u^{\text{réf}}(hx_i)| \quad (4.24)$$

et l'erreur moyenne globale ε_g

$$\varepsilon_g^{\text{rés/réf}} = \frac{1}{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} |u^{\text{rés}}(r_j) - u^{\text{réf}}(r_j)| \quad (4.25)$$

par rapport à une fonction de référence $u^{\text{réf}}$. L'erreur globale ε_g est déterminée en choisissant N_p points r_j uniformément répartis sur l'intervalle $[0, r_{\text{max}}]$.

Nous utilisons comme fonction de référence celle provenant d'un calcul variationnel sur une base équivalente à la base des fonctions de Lagrange. De plus nous ne considérons ici que des états liés d'un potentiel pour lequel les solutions analytiques exactes sont connues. Ceci nous fournit une deuxième fonction de référence qui est donc la fonction d'onde exacte de l'état considéré.

TAB. 4.6 – Erreurs moyennes sur les fonctions d’onde des niveaux $n_r = 0$ et $n_r = 5$ pour un potentiel d’oscillateur harmonique dans le cas $l = 0$.

Calcul	n_r	N	rés/ex ε_r	rés/ex ε_g	var/ex ε_r	var/ex ε_g	rés/var ε_r	rés/var ε_g
<i>(PC)</i>	0	20	$< 10^{-15}$	$4 \cdot 10^{-15}$	10^{-15}	$4 \cdot 10^{-15}$	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$
	5	20	$3 \cdot 10^{-9}$	$2 \cdot 10^{-8}$	$6 \cdot 10^{-9}$	$2 \cdot 10^{-8}$	$3 \cdot 10^{-9}$	$3 \cdot 10^{-9}$
	5	40	10^{-13}	$3 \cdot 10^{-13}$	10^{-13}	$3 \cdot 10^{-13}$	10^{-15}	10^{-15}
<i>(Lr)</i>	0	20	10^{-9}	$2 \cdot 10^{-8}$	$2 \cdot 10^{-8}$	$2 \cdot 10^{-8}$	$2 \cdot 10^{-8}$	$2 \cdot 10^{-8}$
	0	40	$3 \cdot 10^{-14}$	$3 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-14}$	$3 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-14}$
	5	20	$2 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$3 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-4}$
	5	40	$5 \cdot 10^{-11}$	$6 \cdot 10^{-10}$	$9 \cdot 10^{-10}$	$9 \cdot 10^{-10}$	10^{-9}	$9 \cdot 10^{-10}$

Afin de comparer les résultats de la méthode des réseaux de Lagrange et ceux d’un calcul variationnel équivalent, nous définissons les erreurs $\varepsilon_r^{\text{var/ex}}$ et $\varepsilon_g^{\text{var/ex}}$ sur la fonction d’onde variationnelle similairement aux erreurs $\varepsilon_r^{\text{rés/réf}}$ et $\varepsilon_g^{\text{rés/réf}}$. La fonction de référence est dans ce cas la fonction d’onde exacte.

Le tableau 4.6 reprend les résultats pour les différentes erreurs définies plus haut obtenus dans le cas du potentiel d’oscillateur harmonique avec $l = 0$ pour les états $n_r = 0$ et $n_r = 5$. Les fonctions d’onde exactes des différents états liés sont alors données par (4.14). Nous considérons les méthodes *(PC)* et *(Lr)*, et les mêmes conditions de calculs que pour les énergies des états liés. Le paramètre r_{max} intervenant dans la définition de ε_g est choisi égal à 6 et le nombre de points N_p vaut 200.

La première constatation est que les erreurs ε_r et ε_g sont du même ordre, ce qui signifie que l’approximation de la fonction d’onde obtenue par la méthode des réseaux de Lagrange est aussi précise sur l’ensemble des points du réseau que sur tout le domaine $[0, \infty[$. En ceci la méthode est proche des calculs variationnels pour lesquels les points du réseaux ne jouent pas un rôle particulier. Les commentaires qui suivent s’appliquent donc aussi bien à ε_r qu’à ε_g .

Nous remarquons également que les erreurs $\varepsilon_r^{\text{rés/ex}}$ et $\varepsilon_g^{\text{var/ex}}$ des calculs sur réseau et variationnel par rapport à la fonction d’onde exacte sont du même ordre de grandeur, ce qui implique que l’approximation de la fonction d’onde obtenue par le calcul sur réseau est aussi bonne que celle obtenue par le calcul variationnel équivalent. Ce résultat est très intéressant car, combiné avec les observations faites sur les énergies des états liés, il nous indique que la propriété du calcul variationnel, selon laquelle l’erreur sur l’estimation de l’énergie est quadratique en l’erreur sur la fonction d’onde, semble encore valable dans le cas de la méthode sur réseau de Lagrange. Ceci est confirmé par un calcul *(PC)* effectué avec $N = 20$ fonctions de base et un facteur d’échelle $h = 5$, qui est assez différent de la valeur optimale $h = 8$ (voir le tableau 4.4). Avec ces conditions de calcul, nous obtenons une erreur sur l’énergie du niveau $n_r = 0$ de $4 \cdot 10^{-9}$, à la fois avec le calcul variationnel exact et avec le réseau de Lagrange à pas constant. Les erreurs aux points du réseau ε_r et globale ε_g sur la fonction d’onde associée par rapport à la fonction d’onde exacte sont équi-

valentes dans les deux calculs, et valent $\varepsilon_r = 8 \cdot 10^{-7}$ et $\varepsilon_g = 8 \cdot 10^{-5}$. Par contre les erreurs ε_r et ε_g sur la fonction d'onde sur réseau par rapport à la fonction d'onde variationnelle sont comprises entre $4 \cdot 10^{-9}$ et $6 \cdot 10^{-9}$. La fonction d'onde sur réseau de Lagrange est donc plus proche de la fonction d'onde du calcul variationnel équivalent que de la fonction d'onde exacte. Ces résultats nous indiquent que la convergence du calcul sur réseau de Lagrange est semblable à celle du calcul variationnel, puisque les erreurs sur l'énergie et la fonction d'onde sont similaires pour les deux calculs lorsque nous nous éloignons de la valeur optimale du paramètre variationnel h . Le lien quadratique entre l'erreur sur l'énergie et l'erreur sur la fonction d'onde, même si il n'est pas exact, est donc vérifié avec une bonne approximation dans le cas de la méthode des réseaux de Lagrange.

L'erreur sur la fonction d'onde du calcul sur réseau par rapport au calcul variationnel est toujours du même ordre ou inférieure aux erreurs par rapport à la fonction d'onde exacte. Il en découle que les résultats sur réseau de Lagrange sont très proches de ceux du calcul variationnel. Toute application pouvant être traitée de manière précise à l'aide d'un calcul variationnel peut ainsi en principe être étudiée aussi précisément et plus simplement avec la méthode des réseaux de Lagrange. Cependant un réseau, dont les fonctions de Lagrange sont équivalentes aux fonctions de base du calcul variationnel, n'existe pas toujours.

Nous ne présentons pas de résultat pour le potentiel de Morse, ni pour un moment cinétique $l = 1$. Ils sont en effet similaires à ceux présentés au tableau 4.6, et conduisent donc aux mêmes commentaires.

4.4 Méthodes sur réseaux

Après avoir comparé quelques calculs sur réseau de Lagrange avec des calculs variationnels équivalents, nous comparons les résultats obtenus avec différents réseaux de Lagrange et également ceux d'un calcul par différences finies. Bien que basé sur une formule à seulement trois points pour le terme d'énergie cinétique, ce dernier calcul nous sert d'exemple type des méthodes sur réseau traditionnelles. Pour notre calcul de différences finies nous utilisons les N points de discrétisation définis par hi/N , avec $i = 1, \dots, N$, où le facteur h permet d'ajuster le domaine $[0, h]$ de définition du réseau au problème étudié. La matrice d'énergie cinétique est alors de la forme (3.3), et la matrice potentielle est diagonale et ses éléments sont donnés par le potentiel évalué aux points du réseau.

En ce qui concerne les réseaux de Lagrange, nous considérons le réseau à pas constant (PC), le réseau à pas exponentiel (PE), le réseau de Laguerre (Lr) et enfin le réseau de gaussiennes (G) définis au chapitre 2. Comme le réseau à pas constant dont il est une variante, le réseau à pas exponentiel est défini sur l'intervalle $[0, 1]$. Une erreur de troncature de l'intervalle $[0, \infty[$ apparaît donc également dans le calcul (PE). Néanmoins nous choisissons le facteur d'échelle h de telle sorte que cette erreur soit inférieure aux erreurs numériques et à celles dues à l'approximation de Gauss.

A nouveau nous divisons notre analyse en deux parties. En premier lieu, nous étudions la détermination des énergies des états liés, et ensuite nous examinons les approximations des fonctions d'onde associées à ces états.

4.4.1 Energies d'états liés

Pour comparer différents calculs sur réseau nous considérons les potentiels d'oscillateur harmonique et coulombien, pour lesquels il existe une formule analytique exacte pour les énergies des états liés.

Potentiel d'oscillateur harmonique à trois dimensions

Nous étudions les niveaux $n_r = 0, 5$ et 10 pour le potentiel d'oscillateur harmonique dans les cas d'un moment cinétique orbital l égal à 0 et 1 . Les valeurs exactes pour les énergies de ces niveaux sont déterminées par la formule (4.12). Le tableau 4.7 reprend les erreurs sur les énergies obtenues par les différents calculs dans le cas $l = 0$. Nous obtenons de très bons résultats avec les différents réseaux de Lagrange avec 60 points. Par contre, le calcul par différences finies ne fournit avec un même nombre de points qu'une précision limitée. Ceci n'est pas étonnant puisque l'erreur sur l'énergie est dans ce cas de l'ordre de $(h/N)^2$, c'est-à-dire environ 10^{-3} . Des calculs par différences finies plus élaborés, avec des formules à plus de trois points pour le terme d'énergie cinétique, peuvent fournir une précision améliorée. Par exemple, l'utilisation d'une formule à 5 points réduit l'erreur sur l'énergie de l'état $n_r = 0$ à environ 10^{-6} avec $N = 60$ points. Néanmoins une précision comparable à celle obtenue avec les réseaux de Lagrange nécessite d'augmenter fortement (de 10 à 100

TAB. 4.7 – Erreurs absolues obtenues par différentes méthodes sur réseau sur les énergies des niveaux $n_r = 0, 5$ et 10 pour un potentiel d'oscillateur harmonique dans le cas $l = 0$.

Calcul	N	a/α	h	$\varepsilon(n_r = 0)$	$\varepsilon(n_r = 5)$	$\varepsilon(n_r = 10)$
Différences finies	20		3	$-6 \cdot 10^{-4}$	/	/
	40		5	$-2 \cdot 10^{-3}$	-10^{-2}	/
	60		5	-10^{-3}	$9 \cdot 10^{-2}$	/
(PC)	20		8	$-5 \cdot 10^{-15}$	$2 \cdot 10^{-12}$	$6 \cdot 10^{-5}$
	40		12	$< 10^{-15}$	$-2 \cdot 10^{-14}$	$< 10^{-15}$
(PE)	20	4	5	10^{-5}	$4 \cdot 10^{-3}$	/
	40	1	9	$2 \cdot 10^{-6}$	$7 \cdot 10^{-6}$	10^{-5}
	60	1	9	$7 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$
(Lr)	20		0.11	$-3 \cdot 10^{-14}$	$3 \cdot 10^{-4}$	/
	40		0.07	$-2 \cdot 10^{-14}$	$-4 \cdot 10^{-14}$	$6 \cdot 10^{-9}$
	60		0.09	$2 \cdot 10^{-13}$	$2 \cdot 10^{-13}$	10^{-13}
(G)	20	0.3	0.9	$5 \cdot 10^{-12}$	$-9 \cdot 10^{-12}$	$-7 \cdot 10^{-13}$
	40	0.3	1.0	$-9 \cdot 10^{-12}$	$2 \cdot 10^{-11}$	$2 \cdot 10^{-12}$

fois) le nombre de points de discrétisation du calcul par différences finies.

Le réseau à pas exponentiel (PE) est le moins précis des réseaux de Lagrange, mais reste néanmoins intéressant puisqu'il fournit une erreur de l'ordre de 10^{-6} sur les cinq premiers niveaux avec 40 points. Avec ce même nombre de points le réseau à pas constant (PC) atteint déjà la limite de précision de la machine pour les onze premiers niveaux. Le réseau de Laguerre fournit des résultats comparables mais nécessite un peu plus de points pour obtenir une aussi bonne précision sur l'énergie du niveau $n_r = 10$.

Afin d'illustrer les différences entre ces réseaux de Lagrange, la répartition des points de ces réseaux est représentée à la figure 4.2 pour $N = 40$, et avec le facteur d'échelle h utilisé au tableau 4.7. Les points du réseau à pas

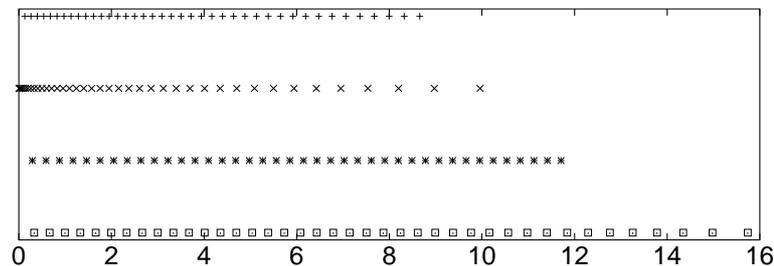


FIG. 4.2 – Répartition des points des différents réseaux de Lagrange pour $N = 40$, avec le facteur d'échelle correspondant au tableau 4.7. Le réseau à pas exponentiel (PE) correspond aux *, le réseau de Laguerre (Lr) aux x, le réseau à pas constant (PC) aux + et le réseau de gaussiennes (G) aux □.

exponentiel (PE) sont concentrés sur un intervalle plus court que les trois

autres réseaux. De plus les fonctions de Lagrange correspondantes, avec leur forme particulière due à la transformation (2.90), simulent plus difficilement les états liés du potentiel d'oscillateur harmonique. Ces deux caractéristiques du réseau à pas exponentiel sont à l'origine de ses relativement moins bons résultats.

Le réseau de gaussiennes est quant à lui parfaitement adapté à ce problème-ci. En effet les fonctions de Lagrange contiennent un facteur gaussien permettant de bien reproduire le comportement asymptotique des fonctions d'onde des différents états liés du potentiel d'oscillateur harmonique. Ceci est confirmé par une précision de l'ordre de 10^{-12} sur les onze premiers niveaux obtenue avec seulement 20 points.

Au tableau 4.8 sont indiquées les erreurs obtenues sur les énergies des niveaux $n_r = 0, 5$ et 10 pour $l = 1$. Du fait de la présence du terme centrifuge, aux réseaux à pas constant et de gaussiennes sont associées des fonctions de Lagrange régularisées. Lorsque les fonctions de Lagrange sont régularisées, le

TAB. 4.8 – Erreurs absolues sur les énergies des niveaux $n_r = 0, 5$ et 10 pour un potentiel d'oscillateur harmonique dans le cas $l = 1$.

Calcul	N	a/α	h	$\varepsilon(n_r = 0)$	$\varepsilon(n_r = 5)$	$\varepsilon(n_r = 10)$
Différences finies	20		12	$-3 \cdot 10^{-3}$	/	/
	40		17	$-2 \cdot 10^{-3}$	/	/
	60		6	$2 \cdot 10^{-2}$	$-6 \cdot 10^{-2}$	/
(PCr)	20		8	$-7 \cdot 10^{-15}$	10^{-11}	$2 \cdot 10^{-4}$
	40		11	$4 \cdot 10^{-15}$	$9 \cdot 10^{-15}$	$-3 \cdot 10^{-14}$
	60		9	-10^{-8}	-10^{-7}	$-5 \cdot 10^{-6}$
(PE)	20	4	5	$-5 \cdot 10^{-7}$	$7 \cdot 10^{-2}$	/
	40	4	8	$-3 \cdot 10^{-7}$	$-3 \cdot 10^{-6}$	$-4 \cdot 10^{-3}$
	60	5	9	-10^{-8}	-10^{-7}	$-5 \cdot 10^{-6}$
(Lr)	20		0.1	-10^{-12}	$7 \cdot 10^{-4}$	/
	40		0.08	$< 10^{-15}$	$-7 \cdot 10^{-15}$	$-3 \cdot 10^{-7}$
	60		0.09	10^{-13}	$4 \cdot 10^{-14}$	-10^{-14}
(Gr)	20	0.3	0.9	$-2 \cdot 10^{-12}$	$2 \cdot 10^{-12}$	$-2 \cdot 10^{-11}$
	40	0.3	0.6	$-5 \cdot 10^{-12}$	$-8 \cdot 10^{-12}$	$-2 \cdot 10^{-11}$

réseau à pas constant (PCr) fournit d'aussi bons résultats pour $l = 1$ que le calcul (PC) pour $l = 0$. La précision du calcul par différences finies est par contre toujours limitée à 10^{-3} lorsque le nombre N de points ne dépasse pas 60.

Le réseau de Laguerre reste quant à lui toujours aussi performant quelque soit la valeur du moment cinétique l , et constitue donc un bon réseau de Lagrange pour traiter des problèmes radiaux.

Le réseau à pas exponentiel (PE) fournit des résultats légèrement améliorés par rapport au cas $l = 0$, sans nécessiter de régularisation des fonctions de Lagrange. Il peut donc aussi être utilisé pour étudier les niveaux correspondant à diverses valeurs de l . Ceci est lié à la répartition des points de ce réseau

qui présente une concentration près de l'origine qui permet de simuler plus facilement le comportement en r^{l+1} d'un état de moment cinétique l .

Le réseau de gaussiennes doit quant à lui obligatoirement avoir des fonctions de Lagrange régularisées pour étudier les niveaux $l = 1$, sous peine de perdre la précision. La régularisation effectuée, ce réseau est à nouveau le mieux adapté pour traiter le problème (4.2) avec le potentiel d'oscillateur harmonique. En effet il fournit à nouveau une précision de l'ordre de 10^{-12} sur les énergies des premiers niveaux avec seulement 20 points. La dépendance de la précision des résultats de ce réseau en fonction de l est particulière. Celle-ci est fonction de la parité de l , le calcul (G) se révélant précis lorsque l est pair, et le calcul (Gr) lorsque l est impair. Ceci peut se comprendre en examinant l'expression des fonctions de Lagrange associées. Elles s'écrivent comme le produit d'un polynôme en $\sinh^2(ar/2)$ que multiplie la racine carrée de la fonction poids définie par (2.119). Ce dernier facteur fait intervenir la fonction $\sinh(ar/2)$, et les fonctions de Lagrange se comportent près de l'origine comme une gaussienne multipliée par des fonctions en r^k où k est impair. Ces fonctions permettent donc d'approcher les fonctions d'onde dans le cas où l est pair, tandis que les fonctions régularisées sont mieux adaptées à reproduire les fonctions d'onde lorsque l est impair.

Potentiel coulombien

Le tableau 4.9 reprend les erreurs obtenues sur les énergies des niveaux $n_r = 0, 5$ et 10 pour le potentiel coulombien dans le cas $l = 0$. Les valeurs de référence de ces énergies sont déterminées par (4.16). Seuls les calculs sur

TAB. 4.9 – Erreurs absolues sur les énergies des niveaux $n_r = 0, 5$ et 10 pour un potentiel coulombien dans le cas $l = 0$.

Calcul	N	a/α	h	$\varepsilon(n_r = 0)$	$\varepsilon(n_r = 5)$	$\varepsilon(n_r = 10)$
(PE)	20	10	14	$2 \cdot 10^{-6}$	/	/
	40	12	13	$5 \cdot 10^{-8}$	/	/
	60	12	14	10^{-8}	/	/
(Lr)	1		0.5	$< 10^{-15}$	/	/
	6		3	/	$< 10^{-15}$	/
	11		5.5	/	$-7 \cdot 10^{-4}$	$< 10^{-15}$
	20		1.5	$-4 \cdot 10^{-10}$	$7 \cdot 10^{-8}$	/
	40		2.1	10^{-14}	$< 10^{-15}$	$7 \cdot 10^{-8}$
	60		2.5	10^{-13}	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$

les réseaux à pas exponentiel (PE) et de Laguerre (Lr) sont considérés. En effet les calculs (PC) et (G) ne parviennent pas à converger vers les énergies exactes, mais restent limités à une erreur d'environ 10^{-3} sur les valeurs de ces énergies. Ceci est dû aux faibles énergies des états liés du potentiel coulombien qui induisent une décroissance exponentielle très lente des fonctions d'onde.

Ce comportement ne peut pas être reproduit facilement par les fonctions de Lagrange associées aux réseaux à pas constant (*PC*) et de gaussiennes (*G*).

Le réseau à pas exponentiel par contre fournit encore une bonne précision sur l'énergie de l'état fondamental, de l'ordre de 10^{-8} avec $N = 40$. Mais il se révèle incapable de traiter les niveaux excités de ce potentiel, probablement pour les raisons explicitées ci-dessus.

Le réseau de Laguerre est quant à lui le réseau idéal pour étudier le potentiel coulombien. Effectivement les fonctions de Lagrange-Laguerre ont une forme similaire à celle des fonctions d'onde des états liés de ce potentiel (4.18). Elles s'écrivent comme le produit d'une exponentielle et d'un polynôme en r . En fait, comme toutes les fonctions de Lagrange présentent la même exponentielle (2.109), il existe un choix du facteur d'échelle h qui permet de reproduire exactement la fonction d'onde d'un état n donné à l'aide d'un minimum de fonctions de Lagrange. Le meilleur facteur h pour un état n est ainsi déterminé par $h = n/2$, et le nombre de fonctions de Lagrange nécessaires vaut alors n .

Les trois premières lignes du calcul (*Lr*) correspondent à ce choix du facteur h pour chacun des trois états considérés. A chaque fois nous utilisons seulement $N = n$ fonctions de Lagrange pour reproduire l'énergie de l'état n à la précision de la machine.

Bien entendu les erreurs sur les énergies des autres niveaux ne sont pas minimales avec ces valeurs de h et de N . Nous avons donc également repris dans le tableau 4.9 les résultats des calculs effectués avec des facteurs d'échelle permettant de minimiser les erreurs sur les énergies de plusieurs niveaux simultanément. Il est alors possible de rendre celles des onze premiers états inférieures à 10^{-15} avec seulement $N = 60$ points.

4.4.2 Fonctions d'onde d'états liés

Pour compléter la comparaison des différentes méthodes sur réseau nous considérons les fonctions d'onde dans le cas du potentiel harmonique pour $l = 0$. Nous utilisons les formules d'erreurs (4.24) et (4.25) avec la fonction d'onde exacte (4.14) comme fonction de référence. Pour ε_g nous prenons toujours 200 points uniformément répartis sur l'intervalle $[0, r_{max}]$, avec $r_{max} = 6$. L'erreur ε_g ne s'applique évidemment pas au calcul par différences finies puisque la fonction d'onde n'est alors connue qu'aux points de la discrétisation.

Le tableau 4.10 reprend les résultats pour ces erreurs dans les cas des réseaux de Lagrange à pas constant (*PC*), à pas exponentiel (*PE*), de Laguerre (*Lr*) et de gaussiennes (*G*), et pour le calcul par différences finies, pour les niveaux $n_r = 0$ et $n_r = 5$. Tous les résultats sont obtenus avec $N = 40$ points de réseau, et avec les mêmes conditions de calcul que pour les énergies (tableau 4.7).

Les résultats ε_r et ε_g pour les différents réseaux de Lagrange nous indiquent que les fonctions d'onde approchées sont aussi précises sur l'ensemble des points du réseau que sur tout le domaine de définition du problème. Nous obtenons donc une estimation globale de la fonction d'onde et pas uniquement aux points du réseau comme c'est le cas des méthodes sur réseau traditionnelles. Ceci constitue un avantage de la méthode des réseaux de Lagrange vis-à-vis des

TAB. 4.10 – Erreurs moyennes sur les fonctions d'onde des niveaux $n_r = 0$ et $n_r = 5$ pour un potentiel d'oscillateur harmonique dans le cas $l = 0$. Le nombre de points de réseau vaut $N = 40$ dans tous les cas, et les conditions de calcul sont celles du tableau 4.7.

Calcul	n_r	rés/ex ε_r	rés/ex ε_g
Différences finies	0	$7 \cdot 10^{-4}$	
	5	$6 \cdot 10^{-2}$	
(PC)	0	$< 10^{-15}$	$< 10^{-15}$
	5	10^{-13}	$3 \cdot 10^{-13}$
(PE)	0	$2 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-5}$
	5	$4 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$
(Lr)	0	$3 \cdot 10^{-14}$	$3 \cdot 10^{-14}$
	5	$5 \cdot 10^{-11}$	$6 \cdot 10^{-10}$
(G)	0	$6 \cdot 10^{-13}$	10^{-12}
	5	$2 \cdot 10^{-12}$	$5 \cdot 10^{-12}$

méthodes sur réseau classiques.

En se référant au tableau 4.7 donnant les erreurs sur les énergies des niveaux, nous constatons qu'il existe un lien entre la précision sur les valeurs des énergies et sur les fonctions d'onde approchées associées au même état. En effet l'erreur sur l'énergie diminue avec l'erreur sur la fonction d'onde comme nous pouvons le voir en comparant les précisions sur les niveaux $n_r = 0$ et $n_r = 5$. Cette propriété découle de l'origine variationnelle de la méthode. Dans les méthodes variationnelles, l'erreur sur l'énergie varie comme le carré de l'erreur sur la fonction d'onde. Dans le cas de la méthode des réseaux de Lagrange, qui est une méthode variationnelle *approchée*, cette propriété n'est probablement pas exacte. Néanmoins les différents résultats obtenus nous laissent supposer qu'elle est vérifiée au moins approximativement.

4.5 Systèmes à deux corps semi-relativistes

Nous analysons ici l'utilisation de la méthode des réseaux de Lagrange pour l'étude de systèmes à deux corps avec une dynamique semi-relativiste. Pour ce faire, nous considérons l'équation de Salpeter sans spin [JOS86], qui est un cas particulier de l'équation de Bethe-Salpeter [SB51]. La grande différence avec l'équation de Schrödinger provient du terme cinétique T qui devient dans le cas d'un système à deux corps de masses m_1 et m_2

$$T = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_1^2} + \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_2^2}, \quad (4.26)$$

où $\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ représente la racine carrée positive de l'opérateur $\mathbf{p}^2 + m^2$, \mathbf{p} étant l'impulsion associée à la coordonnée relative \mathbf{r} entre les deux particules, et où nous utilisons les unités $\hbar = c = 1$. L'équation de Salpeter sans spin

s'écrit alors

$$\left(\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_1^2} + \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_2^2} + V(r)\right) \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (4.27)$$

où Ψ est la fonction d'onde dépendant de la coordonnée relative, et E est l'énergie correspondante. Comme précédemment, le potentiel V est supposé central, et la fonction d'onde peut être factorisée selon (4.1). L'équation (4.27) est utilisée notamment pour étudier le spectre des mésons, qui sont formés d'un quark et d'un anti-quark [JOS86, Ful94].

4.5.1 Calculs variationnel approché et sur réseau de Lagrange

Comme dans le cas de l'équation de Schrödinger, nous pouvons rechercher les solutions de l'équation (4.27) au moyen d'un calcul variationnel. La fonction radiale $u(r)$ est donc développée dans une base de N fonctions choisies φ_k (2.10). L'évaluation des éléments de matrice du potentiel dans la base φ_k est identique au cas de l'équation de Schrödinger. Par contre l'énergie cinétique nécessite une procédure différente en raison de son expression particulière (4.26). Celle-ci fait en effet intervenir des racines carrées d'une fonction de \mathbf{p}^2 , ce dernier correspondant à l'opérateur laplacien. Pour la détermination des éléments de matrice de l'énergie cinétique (4.26), nous utilisons la technique décrite dans l'article de Fulcher [Ful94]. Les éléments de matrice $\langle \varphi_i | \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2} | \varphi_j \rangle$ sont calculés approximativement en quatre étapes [SBHS01]

1. Calcul de la matrice M^2 dont les éléments sont

$$(M^2)_{ij} = \langle \varphi_i | \mathbf{p}^2 + m^2 | \varphi_j \rangle. \quad (4.28)$$

Ces éléments sont calculés de la même manière que dans le cas non relativiste. Ils sont la somme des éléments de l'opérateur $\mathbf{p}^2 = -\Delta = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}$ et des éléments du terme de masse, ceux-ci dépendant du produit scalaire des fonctions φ_k puisque la masse est une constante.

2. Diagonalisation de la matrice M^2 . Si D^2 est la matrice diagonale formée des valeurs propres de M^2 , nous avons

$$M^2 = S D^2 S^{-1} \quad (4.29)$$

où S est la matrice de transformation composée des vecteurs propres normalisés.

3. Calcul de D , qui est la matrice diagonale racine carrée de D^2 . Cette matrice est obtenue en prenant les racines carrées positives de tous les éléments diagonaux de D^2 .
4. Détermination de la matrice racine carrée M dans la base initiale en utilisant la transformation (4.29)

$$M = S D S^{-1}. \quad (4.30)$$

Les éléments M_{ij} de la matrice calculée avec (4.30) sont des approximations des nombres $\langle \varphi_i | \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2} | \varphi_j \rangle$. En effet la diagonalisation est effectuée dans l'espace des configurations limité défini par les N fonctions de base φ_k . C'est pour cette raison que nous parlons de calcul variationnel approché. Afin de calculer exactement les éléments de matrice de l'opérateur $\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$, il est nécessaire d'évaluer exactement toutes les valeurs propres de la matrice infinie dont les éléments sont $\langle \varphi_i | \mathbf{p}^2 + m^2 | \varphi_j \rangle$, si les φ_i sont étendus pour former une base complète. Ceci n'est évidemment pas possible.

Nous particularisons maintenant la procédure décrite plus haut au cas de la méthode des réseaux de Lagrange. Nous considérons un réseau de Lagrange formé des N points x_i et des N fonctions de Lagrange f_i associées. Le facteur d'échelle permettant d'ajuster la position des points du réseau est noté h . Les fonctions de base $\varphi_i(r)$ deviennent alors les fonctions de Lagrange $f_i(r/h)$, en écrivant explicitement la dépendance en h des fonctions.

Dans le cas des fonctions de base de Lagrange, nous pouvons examiner plus en détails les expressions des éléments de matrice du hamiltonien. Les éléments de matrice du potentiel sont toujours évalués à l'approximation de Gauss, comme dans le cas non-relativiste, et sont donnés par le potentiel évalué aux points du réseau (2.16). Dans le cas du terme cinétique, nous pouvons détailler les éléments nécessaires à la première étape de la procédure de calcul. Les éléments de matrice de l'opérateur \mathbf{p}^2 peuvent s'écrire

$$\langle f_i | \mathbf{p}^2 | f_j \rangle = \frac{1}{h^2} T_{ij} + \frac{l(l+1)}{h^2 x_i^2} \delta_{ij} \quad (4.31)$$

où l est le moment cinétique orbital relatif des deux particules, et T_{ij} est l'élément de matrice de l'opérateur dérivée seconde entre fonctions de Lagrange. Des exemples de ces éléments T_{ij} sont donnés au chapitre 2 pour différents réseaux de Lagrange. Le terme de masse m^2 est quant à lui déterminé en utilisant l'orthonormalité des fonctions f_i

$$\langle f_i | m^2 | f_j \rangle = m^2 \delta_{ij}. \quad (4.32)$$

4.5.2 Exemple : système de deux quarks

Pour illustrer l'utilisation de la méthode des réseaux de Lagrange pour résoudre l'équation de Salpeter (4.27), nous considérons l'étude de mésons, formé d'un quark et d'un anti-quark, dont l'interaction est décrite par le potentiel de Cornell [Ful94]

$$V(r) = Ar - \frac{\kappa}{r} + C \quad (4.33)$$

où A est la constante de rappel, κ est le paramètre de Coulomb, et C est une constante additive dépendant du type de quarks. Ce potentiel présente donc une attraction coulombienne aux courtes distances, et une dépendance linéaire en la distance qui induit le confinement des deux quarks. Aucune solution analytique n'est connue pour l'équation de Salpeter sans spin (4.27) avec le potentiel (4.33).

Pour déterminer les masses des mésons nous utilisons le réseau de Laguerre, puisque nous traitons un problème radial ($0 \leq r < \infty$). Ce réseau est en effet

l'un des plus performants d'après l'étude effectuée sur l'équation de Schrödinger dans ce même chapitre. Les fonctions de Lagrange-Laguerre (2.109) sont régularisées (2.122) à cause de la singularité du terme centrifuge lorsque l est différent de zéro. Les éléments de matrice T_{ij} sont alors donnés par (2.127) et (2.128) à l'approximation de Gauss. Afin de distinguer les erreurs de la méthode des réseaux, liées à l'utilisation de l'approximation de Gauss, de celles provenant de la procédure décrite précédemment pour déterminer l'énergie cinétique, nous effectuons également un calcul variationnel (approché) basé sur les mêmes fonctions de Lagrange-Laguerre régularisées. Les éléments de matrice du potentiel sont dans ce cas évalués exactement, et les expressions exactes (2.125) et (2.126) sont utilisées pour le terme cinétique T_{ij} . De plus les fonctions de base n'étant pas exactement orthogonales, nous devons alors résoudre un problème généralisé.

Pour l'application numérique nous choisissons le méson $u\bar{u}$ [SBHS01], où u représente le quark up, et la barre au-dessus de u identifie l'anti-particule. Les paramètres du potentiel de Cornell (4.33) sont présentés au tableau 4.11, de même que la masse du quark.

TAB. 4.11 – Paramètres du potentiel de Cornell pour le méson $u\bar{u}$, et masse du quark u . Les unités sont définies par $\hbar = c = 1$, et l'unité de masse est le GeV.

A	0.203 GeV ²
κ	0.437
$C_{u\bar{u}}$	-0.599 GeV
m_u	0.15 GeV

Au tableau 4.12 sont indiqués les résultats pour les masses des états $1S$, $2S$, $1P$, et $1D$ du méson $u\bar{u}$ en GeV, en fonction du nombre de fonctions de base, à la fois pour le calcul sur réseau de Laguerre et le calcul variationnel. Le facteur d'échelle h est optimisé grossièrement à 0.05 GeV^{-1} pour les états S , et à 0.1 GeV^{-1} pour les états $1P$ et $1D$. Dans le cas des états S , pour $N = 10$, un plus grand facteur d'échelle $h = 0.1 \text{ GeV}^{-1}$ est nécessaire pour bien couvrir la région où la fonction d'onde est importante. Pour estimer la précision des résultats nous effectuons dans les deux cas un calcul avec $N = 80$ fonctions qui nous sert de référence. Nous avons indiqué à la dernière ligne la valeur obtenue par Fulcher [Ful94] pour ces mêmes masses. Fulcher effectue un calcul variationnel avec une base formée de 20 polynômes de Laguerre associés dépendant du moment cinétique orbital l de l'état étudié, multipliés par leur fonction poids (voir annexe A). Il ne présente que trois décimales car il se compare à des valeurs extraites de données expérimentales pour lesquelles l'erreur est supérieure à 1 MeV.

La comparaison des résultats obtenus par calcul variationnel et sur réseau de Lagrange illustre la validité de la méthode des réseaux de Lagrange, puisque l'utilisation de l'approximation de Gauss dans les calculs n'induit aucune perte de précision significative. L'erreur introduite par cette approximation n'est en

TAB. 4.12 – Masses des états $1S$, $2S$, $1P$ et $1D$ du méson $u\bar{u}$ obtenues par un calcul variationnel basé sur les fonctions de Lagrange-Laguerre, et un calcul sur réseau de Laguerre.

Calcul variationnel				
N	$1S$	$2S$	$1P$	$1D$
10	0.702 623	1.416 048	1.240 268	1.641 616
20	0.702 650	1.416 130	1.240 238 178	1.641 599 445
30	0.702 589 4	1.415 888	1.240 238 167 91	1.641 599 442 268
80	0.702 588 7	1.415 885	1.240 238 167 86	1.641 599 442 266
Fulcher	0.703	1.416	1.240	1.642
Calcul sur réseau de Laguerre				
N	$1S$	$2S$	$1P$	$1D$
10	0.702 601	1.416 004	1.240 268	1.641 616
20	0.702 649	1.416 125	1.240 238 177	1.641 599 445
30	0.702 588 2	1.415 887	1.240 238 167 77	1.641 599 442 268
80	0.702 588 4	1.415 885	1.240 238 167 86	1.641 599 442 266

effet jamais supérieure à celle liée à la taille de la base, comme l'indique l'analyse de la convergence des deux calculs lorsque N augmente. Nous retrouvons ainsi les mêmes propriétés de la méthode des réseaux de Lagrange dans le cas de l'équation semi-relativiste (4.27) que dans celui de l'équation de Schrödinger.

Nous obtenons de très bons résultats pour les masses de différents états du méson $u\bar{u}$, en accord avec les valeurs de Fulcher. Un réseau de Laguerre de 10 points fournit déjà une précision suffisante sur les masses pour les comparer avec les valeurs expérimentales. Cette précision peut encore être améliorée en augmentant le nombre N de points du réseau.

Bien que nous ne disposions pas d'expressions exactes pour les fonctions d'onde, ni même de calcul variationnel exact, nous présentons au tableau 4.13 les erreurs sur les fonctions d'onde du calcul sur réseau de Laguerre par rapport au calcul variationnel approché équivalent. L'erreur est déterminée aux points du réseau en accord avec (4.24). Comme dans le cas de l'équation de

TAB. 4.13 – Erreurs sur les fonctions d'onde calculées aux points du réseau de Laguerre. Les conditions de calculs sont identiques à celles du tableau 4.12.

N	$1S$	$2S$	$1P$	$1D$
10	$1.3 \cdot 10^{-3}$	$1.9 \cdot 10^{-3}$	$8.5 \cdot 10^{-5}$	$2.9 \cdot 10^{-5}$
20	$1.9 \cdot 10^{-4}$	$3.3 \cdot 10^{-4}$	$4.3 \cdot 10^{-6}$	$6.4 \cdot 10^{-8}$
30	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$1.8 \cdot 10^{-4}$	$1.7 \cdot 10^{-6}$	$2.7 \cdot 10^{-8}$
80	$4.2 \cdot 10^{-5}$	$5.5 \cdot 10^{-5}$	$1.5 \cdot 10^{-7}$	$9.5 \cdot 10^{-10}$

Schrödinger, nous constatons une évolution en parallèle de la précision de la méthode en ce qui concerne les énergies des états liés et les fonctions d'onde

associées, lorsque la taille de la base est augmentée. La comparaison portant sur deux calculs approchés, nous ne pouvons pas préciser le lien entre l'erreur sur l'énergie et celle sur la fonction d'onde. Ce lien apparaît en examinant les résultats pour les états S d'une part et les états P et D d'autre part, les énergies et les fonctions d'onde étant simultanément plus précises dans ces deux derniers cas.

4.6 Conclusions

Nous avons donc étudié la résolution de l'équation de Schrödinger radiale (4.2) avec la méthode des réseaux de Lagrange dans les cas des potentiels de Morse, d'oscillateur harmonique à trois dimensions et coulombien. La comparaison des résultats avec ceux obtenus par des calculs variationnels utilisant des bases de fonctions équivalentes à celles des fonctions de Lagrange, et par un calcul par différences finies nous fournit quelques informations sur cette méthode.

Un calcul sur réseau de Lagrange se révèle quasiment aussi précis qu'un calcul variationnel équivalent, à la fois en ce qui concerne les énergies des états liés et les fonctions d'onde correspondantes. Ces dernières sont non seulement déterminées aux points du réseau de Lagrange mais aussi en tout point du domaine $[0, \infty[$. L'utilisation de l'approximation de Gauss ne semble donc pas réduire de manière significative la précision des résultats, même si l'erreur qu'elle introduit dans les éléments de matrice du potentiel n'est pas du tout négligeable.

La méthode des réseaux de Lagrange n'est cependant qu'une méthode variationnelle *approchée*, car le principe variationnel n'est plus vérifié, c'est-à-dire que les estimations des énergies des états liés ne constituent plus une borne supérieure des valeurs exactes de ces énergies. En pratique la meilleure estimation est déterminée en analysant la stabilité des résultats vis-à-vis de petites variations du facteur d'échelle, les résultats présentant un palier en fonction de ce dernier.

Les résultats obtenus nous indiquent que toute application pour laquelle la méthode variationnelle des combinaisons linéaires est adaptée, peut en principe être traitée aussi précisément et beaucoup plus simplement par la méthode des réseaux de Lagrange. Bien entendu il n'existe pas toujours un réseau de Lagrange adéquat, c'est-à-dire dont l'ensemble des fonctions de Lagrange est équivalent à la base du calcul variationnel.

Lorsque le nombre N de points du réseau est petit ($N < 100$), la méthode des réseaux de Lagrange est beaucoup plus précise qu'un calcul par différences finies. Cette propriété découle de son origine variationnelle. De plus les méthodes sur réseau classiques fournissent une estimation de la fonction d'onde uniquement aux points du réseau, alors que dans la méthode des réseaux de Lagrange, comme dans toute méthode variationnelle, une fonction d'onde approchée est obtenue sur tout le domaine de définition du problème.

Nous avons également étudié la technique de régularisation à l'aide du potentiel d'oscillateur harmonique lorsque le moment cinétique est non nul. Lorsque les fonctions de Lagrange ne présentent pas le bon comportement à l'origine en r^{l+1} pour un moment cinétique l , elles doivent se combiner de manière à le simuler. Cependant ces fonctions n'ont pas toujours une forme bien adaptée pour reproduire ce type de comportement. Ceci impose dans le meilleur des cas de fortement augmenter le nombre N de points du réseau, et donc de fonctions de Lagrange. Dans ces cas, la technique de régularisation consistant à multiplier les fonctions de Lagrange par une puissance de r fournissant le bon comportement à l'origine, permet d'améliorer les résultats

sans nécessiter d'augmentation du nombre N de points. Nous avons vu comme exemple le réseau à pas constant dont les fonctions de Lagrange de type sinusoïdales doivent être multipliées par r^l afin d'obtenir une bonne précision sur les énergies des états liés correspondant à un moment cinétique l . Ceci conduit à la notion de réseau de Lagrange dépendant de l , qui peuvent être bien adaptés pour traiter un problème associé à une valeur fixée du moment cinétique. Ces réseaux ne conviennent cependant pas pour étudier des applications dans lesquelles plusieurs valeurs de l sont couplées.

Des trois potentiels considérés, le potentiel coulombien est le plus contraignant en ce qui concerne le choix du réseau de Lagrange. Effectivement, les énergies de ses états liés étant très faibles, les fonctions d'onde correspondantes présentent une décroissance exponentielle très lente. Ces états très étendus spatialement sont plus difficilement reproduits par la plupart des réseaux de Lagrange utilisés ici, et nécessitent des tailles N de réseau plus importantes. L'exception provient du réseau de Laguerre, car les fonctions de Lagrange associées sont parfaitement adaptées aux états du potentiel coulombien.

Le réseau de Laguerre, dont les fonctions de Lagrange sont régularisées, représente le meilleur choix pour traiter un problème radial pour de nombreux types de potentiel. Il fournit en effet une très bonne précision pour les trois potentiels considérés dans ce chapitre. De plus, comme il est indépendant de l , il peut être utilisé dans des applications où différentes valeurs du moment cinétique l sont couplées.

Nous avons également illustré dans ce chapitre le caractère plus général de la méthode des réseaux de Lagrange, celle-ci n'étant pas limitée au problème de l'équation de Schrödinger. Nous l'avons ainsi appliquée au problème d'états liés de systèmes à deux corps avec une dynamique semi-relativiste, qui nécessite la résolution de l'équation de Salpeter sans spin. La méthode des réseaux de Lagrange se révèle aussi simple et précise dans ce cas que dans celui de l'équation de Schrödinger, comme le montrent les résultats obtenus lors de l'étude d'un système de deux quarks.

Chapitre 5

Collisions à une et plusieurs voies

5.1 Introduction

La méthode des réseaux de Lagrange permet la détermination des états liés d'une particule dans un champ central avec une précision comparable à celle d'un calcul variationnel (voir le chapitre 4). Le but de ce chapitre est d'étendre cette méthode pour étudier les états libres, c'est-à-dire ceux décrivant la collision de deux particules. Nous nous intéressons ici aux collisions à plusieurs voies, pour lesquelles les deux particules sont les mêmes avant et après la collision, et restent de plus dans leur état initial, c'est-à-dire qu'il n'y a pas d'excitation de l'éventuelle structure interne des particules. A chaque voie correspond un certain mouvement relatif des deux particules. Pour une voie d'entrée fixée, la collision peut donner lieu, selon la valeur de l'énergie, à différentes voies de sortie, éventuellement couplées. En effet, à chaque voie de sortie peut être associée une énergie de seuil en dessous de laquelle cette voie est inaccessible, et nous parlons alors de voie fermée. Lorsque l'énergie est supérieure au seuil, la voie est ouverte, et les deux particules entrant en collision peuvent s'organiser selon la configuration correspondante. Il existe toutefois une voie de sortie toujours accessible, qui correspond à la collision élastique.

Les fonctions d'onde de ces états de collision sont entièrement caractérisées par la matrice de collision dépendant de l'énergie positive et des moments cinétiques orbitaux associés au mouvement relatif des deux particules dans les voies ouvertes. Dans le cas des collisions considérées ici, la matrice de collision peut être exprimée en fonction de déphasages correspondant à chaque voie et des coefficients de couplage entre celles-ci [New82]. Pour déterminer cette matrice de collision et en extraire les déphasages nous généralisons aux collisions à plusieurs voies la méthode employée par Malegat [Mal94] qui utilise le formalisme de la matrice R [LT58, BR75]. Celle-ci est basée sur une division de l'espace en une région intérieure et une région extérieure. Dans la région extérieure, le potentiel d'interaction (hormis l'éventuelle interaction coulombienne) est supposé négligeable, et la fonction d'onde est approchée par son comportement asymptotique exact. Dans la région intérieure la fonction d'onde est développée sur une base de fonctions choisies. Ces fonctions correspondent dans notre cas aux fonctions de Lagrange associées à un réseau [Mal94, BHSV98, HSvRB98].

A l'aide de cette méthode couplant matrice R et réseau de Lagrange, nous

développons également une technique pour étudier les déphasages pour des énergies proches de zéro. Dans ce domaine d'énergies, les déphasages peuvent être représentés de manière précise à l'aide de trois paramètres qui définissent le développement en portée effective : la longueur de diffusion, la portée effective et le paramètre de forme [PB75, HOT73, BHK00]. Ces paramètres peuvent être obtenus par extrapolation des déphasages vers l'énergie nulle. Cependant des problèmes numériques peuvent limiter leur précision. Dans le cas de la portée effective, ce problème est évité en utilisant la formule de Schwinger-Bethe qui exprime ce paramètre à partir d'une intégrale contenant la fonction d'onde à l'énergie nulle [BB54]. En l'absence d'interaction coulombienne, le paramètre de forme est donné par une formule similaire dépendant de la dérivée par rapport à l'énergie de la fonction d'onde à énergie nulle [BB54, vDK92].

Pour déterminer les paramètres du développement en portée effective, nous considérons une approche basée en partie sur l'algorithme de [BB00], mais en utilisant la combinaison des méthodes de la matrice R et des réseaux de Lagrange [BHK00]. La simplicité de cette approche repose en partie sur la connaissance analytique des limites à énergie nulle des solutions de l'équation de Schrödinger et de leurs dérivées par rapport à l'énergie dans la région extérieure. Nous n'étudions ici que le développement en portée effective ordinaire, c'est-à-dire sans aucun potentiel, hormis éventuellement le potentiel coulombien, dans la région extérieure.

Afin d'examiner la précision de la méthode des réseaux de Lagrange dans le contexte de la théorie de la matrice R , nous étudions la diffusion élastique à une voie avec un simple potentiel exponentiel, qui est exactement soluble dans l'onde s [Lay93, Mal94]. Avec ce potentiel, nous effectuons des calculs matrice R "exacts", c'est-à-dire avec une base finie où tous les éléments de matrice sont calculés exactement, qui sont directement comparables aux calculs sur réseau. La base polynomiale correspondant au réseau de Malegat [Mal94] est exactement équivalente à une base de polynômes de Jacobi translatés qui conduit à un réseau de Lagrange différent. Ceci nous permet d'analyser différents aspects de la méthode des réseaux de Lagrange. La méthode est également utilisée dans le cas de la collision à une voie avec un potentiel de Yamaguchi [Yam54, vD89], qui est un potentiel non local séparable. L'équation de Schrödinger avec ce potentiel est analytiquement soluble dans l'onde s .

Nous appliquons ensuite la méthode de la matrice R sur réseau de Lagrange à la collision nucléon-nucléon dans différentes voies en utilisant trois potentiels d'interaction. Il s'agit des potentiels de Reid [RJ68], de Paris [LLR⁺80] et de Bonn [MHE87]. Le premier est un potentiel phénoménologique purement local, alors que les deux autres sont basés sur des considérations physiques et présentent notamment un terme non-local, qui prend la forme d'une dépendance en l'énergie cinétique.

5.2 Matrice de collision et déphasages

Nous considérons un système de deux particules dont l'interaction peut être représentée à l'aide d'un potentiel central, c'est-à-dire dépendant uniquement

de la distance entre les deux particules. Nous supposons que ce système conduit asymptotiquement aux différentes voies représentées par les états orthonormés $|c\rangle$, et que la fonction d'onde totale à l'énergie E peut se développer comme

$$\Psi = \sum_c |c\rangle r^{-1} u_c(r), \quad (5.1)$$

c'est-à-dire que toutes les voies peuvent être décrites, au moins approximativement, avec une même coordonnée radiale r . Cette fonction d'onde étant bornée sur tout l'espace, les fonctions radiales $u_c(r)$ doivent satisfaire la condition à l'origine $u_c(0) = 0$. L'équation de Schrödinger stationnaire s'écrit

$$(H - E)\Psi = 0 \quad (5.2)$$

avec le hamiltonien H du système qui est la somme d'une énergie cinétique T et du potentiel V . En remplaçant Ψ par le développement (5.1) et en projetant sur la voie c , l'équation (5.2) devient

$$(T_c - E)u_c + \sum_{c'} V_{cc'} u_{c'} = 0, \quad (5.3)$$

avec les termes d'énergie cinétique $\langle c|T|c'\rangle = T_c \delta_{cc'}$ et potentielle $\langle c|V|c'\rangle = V_{cc'}$. Puisque l'énergie E_c dans la voie c est définie par rapport à l'énergie de seuil E_{T_c} ($E_c = E - E_{T_c}$), cette énergie de seuil apparaît lors du passage de l'équation (5.2) à (5.3). Nous choisissons ici d'introduire ce terme dans les potentiels $V_{cc'}$. Dans le système (5.3), les énergies cinétiques sont définies par

$$T_c = -\frac{\hbar^2}{2\mu_c} \frac{d^2}{dr^2}, \quad (5.4)$$

où μ_c est la masse réduite de la voie c . Les potentiels diagonaux V_{cc} contiennent éventuellement des termes centrifuges $\hbar^2 l_c(l_c + 1)/2\mu_c r^2$, où l_c est le moment cinétique orbital de la voie c . En fait, de manière générale, tous les potentiels $V_{cc'}$ peuvent être singuliers à l'origine. Ces potentiels, contenant l'énergie de seuil E_{T_c} de la voie c , ont la forme asymptotique

$$V_{cc'} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \left(E_{T_c} + \frac{Z_{1c} Z_{2c} e^2}{r} \right) \delta_{cc'}, \quad (5.5)$$

où $Z_{1c}e$ et $Z_{2c}e$ sont les charges des particules dans cette voie. Le nombre d'onde, la vitesse et le paramètre de Sommerfeld relatifs dans la voie c sont respectivement notés k_c , v_c et $\eta_c = \frac{Z_{1c} Z_{2c} e^2}{\hbar v_c}$.

La matrice de collision $U_{cc'}$ est obtenue à partir du comportement asymptotique des solutions de (5.3)

$$u_c \xrightarrow{r \rightarrow \infty} v_c^{-1/2} [\delta_{ci} I_c(k_c r) - U_{ci} O_c(k_c r)], \quad (5.6)$$

où l'indice i identifie la voie initiale. Les fonctions I_c et O_c sont les fonctions d'onde coulombiennes entrante et sortante en accord avec [LT58]. Elles dépendent de l'énergie E (par l'intermédiaire de k_c et η_c) et du moment cinétique orbital l_c . En pratique ces fonctions I_c et O_c sont souvent remplacées par les

fonctions coulombiennes régulière F_c et irrégulière G_c , qui sont définies par les relations [LT58]

$$\begin{aligned} I_c &= (G_c - iF_c)e^{i\omega_c} \\ O_c &= (G_c + iF_c)e^{-i\omega_c} \end{aligned} \quad (5.7)$$

avec $\omega_c = \sigma_{cl} - \sigma_{c0}$, et où le déphasage coulombien σ_{cl} est égal à $\arg \Gamma(1+l_c+i\eta_c)$. Le coefficient U_{ci} dans (5.6) représente donc l'amplitude du flux de l'onde sortante O_c dans la voie c associé au flux de l'onde entrante I_i dans la voie i . La matrice de collision U peut être paramétrisée à l'aide des déphasages principaux correspondants à chaque voie c et des paramètres de couplage entre les voies. En particulier, lorsque la collision ne fait intervenir qu'une seule voie, la matrice de collision se réduit à un élément U_l , dépendant du moment cinétique orbital l , que nous pouvons encore écrire $U_l = e^{2i\delta_l}$ en fonction du déphasage δ_l dépendant de l'énergie.

La matrice de collision, et par conséquent les déphasages, est définie par (5.6) pour toute énergie E positive. Aux basses énergies ($E \approx 0$), il est également possible de décrire les déphasages de manière précise à l'aide de deux ou trois paramètres. Ceci découle de l'insensibilité de la diffusion élastique aux détails du potentiel d'interaction, qui a notamment été observée sur les résultats des collisions nucléon-nucléon [PB75, BJ49, Bet49, Tei51]. Cette propriété a conduit à la notion de développement en portée effective. Il s'agit de développer une certaine fonction du déphasage, que nous notons $D_l(E)$, en une série de Taylor à deux ou trois termes, dont les coefficients sont appelés respectivement la longueur de diffusion, la portée effective et le paramètre de forme. A l'origine introduit pour l'onde s , ce développement peut être étendu à toutes les ondes partielles [HOT73, vH77].

Dans le cas de collisions de particules n'interagissant pas via la force coulombienne, la fonction $D_l(E)$ s'écrit en fonction du déphasage

$$D_l(E) = k^{-2l-1} \tan \delta_l(E) \quad (5.8)$$

où k est le nombre d'onde. Lorsque les particules sont chargées, la fonction $D_l(E)$ devient

$$D_l(E) = \frac{2}{\pi} \exp(2\pi\eta) \tan \delta_l(E) \quad (5.9)$$

avec le paramètre de Sommerfeld η . Avec ces notations, le développement en portée effective peut s'écrire dans le cas neutre sous la forme [Tei51]

$$\frac{1}{D_l(E)} = -\frac{1}{a_l} + \frac{1}{2}r_l k^2 - P_l r_l^3 k^4 + O(k^6). \quad (5.10)$$

Dans cette expression, a_l est la longueur de diffusion, r_l la portée effective, et P_l le paramètre de forme de l'onde partielle l . Une formule similaire mais plus compliquée s'obtient dans le cas chargé [Tei51, HOT73, vH77]

$$2 \frac{w_l(E)}{l!^2 a_N^{2l+1}} \left[\frac{2}{D_l(E)} + h(E) \right] \approx -\frac{1}{a_l} + \frac{1}{2}r_l k^2 - P_l r_l^3 k^4 + O(k^6). \quad (5.11)$$

avec $w_l(E)$ qui s'écrit [Hum85, BB00]

$$w_l(E) = \prod_{n=1}^l \left(1 + \frac{n^2}{\eta^2} \right). \quad (5.12)$$

Aux basses énergies ($\eta \rightarrow \infty$), cette fonction peut être développée en série selon

$$w_l(E) \approx 1 + \frac{p_1 E}{6E_N} + \frac{p_2 E^2}{144E_N^2} + O(E^3) \quad (5.13)$$

avec $p_1 = l(l+1)(2l+1)$ et $p_2 = \frac{2}{5}l(l^2-1)(4l^2-1)(5l+6)$. La fonction $h(E)$ est quant à elle définie par [PB75, Hum85]

$$h(E) = \frac{1}{2} \left[\frac{\Gamma'(1-i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} + \frac{\Gamma'(1+i\eta)}{\Gamma(1+i\eta)} \right] - \ln(\eta). \quad (5.14)$$

Aux faibles énergies, $h(E)$ est approché par

$$h(E) \approx \frac{E}{12E_N} + \frac{E^2}{120E_N^2} + O(E^3). \quad (5.15)$$

Ces expressions font apparaître un équivalent nucléaire du rayon de Bohr

$$a_N = \hbar^2 / \mu Z_1 Z_2 e^2, \quad (5.16)$$

et de l'énergie de Rydberg

$$E_N = \hbar^2 / 2\mu a_N^2. \quad (5.17)$$

Dans le cas de l'onde s , a_0 et r_0 ont les dimensions d'une longueur et P_0 est sans dimension. Pour les autres ondes partielles leurs dimensions sont plus compliquées mais identiques dans les cas neutre et chargé.

5.3 Méthode de la matrice R

Nous introduisons maintenant le formalisme de la théorie de la matrice R [LT58, BR75] permettant l'étude des collisions à plusieurs voies. Ceci nous conduit à l'équation de Bloch-Schrödinger, dont la résolution, lorsque l'énergie est négative, nous fournit les énergies des états liés. Aux énergies positives nous définissons la matrice R qui nous fournit finalement la matrice de collision, de laquelle peuvent être extraits les déphasages [LT58].

Dans la méthode de la matrice R , l'espace des configurations est divisé au rayon de voie a en une région intérieure et une région extérieure (nous supposons un rayon de voie identique pour toutes les voies). Le formalisme prend une forme élégante en utilisant l'opérateur de surface de Bloch [Blo57]

$$\mathcal{L} = \sum_c |c\rangle \mathcal{L}_c \langle c|, \quad (5.18)$$

avec

$$\mathcal{L}_c = \frac{\hbar^2}{2\mu_c} \delta(r - a) \left(\frac{d}{dr} - \frac{B_c}{r} \right), \quad (5.19)$$

où B_c est un paramètre à la frontière, supposé réel dans la suite. Cet opérateur de Bloch agissant sur la fonction d'onde Ψ est ajouté aux deux membres de l'équation de Schrödinger (5.2) qui devient

$$(H + \mathcal{L} - E)\Psi = \mathcal{L}\Psi. \quad (5.20)$$

En remplaçant Ψ par son développement (5.1), et en projetant sur la voie c , nous obtenons le système d'équations de Bloch-Schrödinger

$$(T_c + \mathcal{L}_c - E)u_c + \sum_{c'} V_{cc'} u_{c'} = \mathcal{L}_c u_c, \quad (5.21)$$

où les opérateurs $T_c + \mathcal{L}_c$ sont hermitiques dans la région intérieure. Dans la région extérieure, la fonction d'onde est approchée par sa forme asymptotique extraite de (5.1) et (5.6). Nous remplaçons donc u_c par (5.6) dans le membre de droite de (5.21). Dans la région intérieure, nous utilisons un développement sur une base finie de fonctions f_n choisies

$$u_c(r) = \sum_{n=1}^N A_{cn} f_n(r). \quad (5.22)$$

Avec les fonctions de base f_n , nous définissons les éléments de matrice $C_{cn,c'n'}$ du hamiltonien avec l'opérateur de Bloch (5.21)

$$C_{cn,c'n'} = \int_0^a f_n(r) [\delta_{cc'} (T_c + \mathcal{L}_c) + V_{cc'}] f_{n'}(r) dr. \quad (5.23)$$

Nous allons voir que la résolution de (5.21) nous fournit les énergies des états liés lorsque l'énergie E est négative, et la matrice de collision lorsque l'énergie E est positive.

5.3.1 Etats liés

Pour une énergie E inférieure à tous les seuils, les énergies E_c sont toutes négatives. La forme asymptotique de la fonction u_c dans la voie c est alors proportionnelle à une fonction de Whittaker $W_c(\kappa_c r)$ [AS65], qui dépend de l_c , $\kappa_c = (-2\mu_c E_c / \hbar^2)^{1/2}$ et du paramètre η_c correspondant [LT58]. Si nous choisissons

$$B_c = a\kappa_c W_c'(\kappa_c a) / W_c(\kappa_c a), \quad (5.24)$$

le second membre de (5.21) s'annule, et le système de Bloch-Schrödinger devient, après projection sur $f_n(r)$,

$$\sum_{c'n'} [C_{cn,c'n'} - E\delta_{cc'}\delta_{nn'}] A_{c'n'} = 0 \quad (5.25)$$

avec la matrice \mathbf{C} définie plus haut. Les paramètres B_c et donc \mathbf{C} dépendent de l'énergie de l'état lié étudié. La détermination de chaque énergie d'état lié nécessite ainsi une procédure itérative partant de valeurs choisies des différents paramètres B_c . En pratique, le choix initial $B_c = 0$ pour toutes les voies c conduit à la convergence au bout de quelques itérations.

5.3.2 Matrice R à plusieurs voies

Pour simplifier nous supposons pour commencer que l'énergie E est plus grande que toutes les énergies de seuil, c'est-à-dire que toutes les voies sont ouvertes, et nous choisissons $B_c = 0$ dans toutes les voies. Après avoir remplacé $u_c(r)$ par sa forme asymptotique (5.6) dans le membre de droite de (5.21), et avoir projeté le système d'équations de Bloch-Schrödinger (5.21) sur la fonction de base $f_n(r)$, nous obtenons le système

$$\sum_{c'n'} (C_{cn,c'n'} - E\delta_{cc'}\delta_{nn'})A_{c'n'} = \frac{\hbar^2 k_c}{2\mu_c \sqrt{v_c}} f_n(a) [\delta_{ci} I'_c(k_c a) - U_{ci} O'_c(k_c a)]. \quad (5.26)$$

Les coefficients A_{cn} , obtenus en résolvant (5.26), nous fournissent avec (5.22) les fonctions radiales

$$\begin{aligned} u_c(r) &= \sum_{c'} \frac{\hbar^2 k_{c'}}{2\mu_{c'} \sqrt{v_{c'}}} [\delta_{c'i} I'_{c'}(k_{c'} a) - U_{c'i} O'_{c'}(k_{c'} a)] \\ &\quad \times \sum_{n,n'=1}^N f_n(r) (\mathbf{C} - E\mathbf{I})_{cn,c'n'}^{-1} f_{n'}(a), \end{aligned} \quad (5.27)$$

où \mathbf{I} est la matrice identité. La fonction u_c dans (5.27) dépend toujours de la matrice de collision inconnue.

Nous définissons maintenant la matrice R . En accord avec [LT58] mais contrairement à certains auteurs [BRT83], nous la choisissons symétrique et adimensionnelle sous la forme

$$R_{cc'} = \frac{\hbar^2}{2\sqrt{\mu_c \mu_{c'}} a} \sum_{n,n'=1}^N f_n(a) (\mathbf{C} - E\mathbf{I})_{cn,c'n'}^{-1} f_{n'}(a). \quad (5.28)$$

En exprimant la continuité des fonctions radiales $u_c(r)$ à la frontière ($r = a$) entre les régions intérieure et extérieure, où elles sont respectivement données par (5.27) et (5.6), nous obtenons un système d'équations liant la matrice de collision U à la matrice R . En posant

$$Z_{c'c} = (k_{c'} a)^{-1/2} [\delta_{c'c} O_c(k_c a) - k_{c'} a R_{cc'} O'_{c'}(k_{c'} a)], \quad (5.29)$$

nous pouvons finalement écrire la matrice de collision sous la forme

$$\mathbf{U} = \mathbf{Z}^{-1} \mathbf{Z}^*. \quad (5.30)$$

Lorsque toutes les voies ne sont pas ouvertes, nous désignons les voies ouvertes par c et les voies fermées par \bar{c} . Puisque les voies fermées ne contribuent pas à la collision, elles n'apportent aucune information sur celle-ci. En pratique il est alors plus intéressant d'éliminer ces voies fermées, ce qui réduit la taille de la matrice R . La valeur de B_c peut être choisie en accord avec (5.24) dans les voies fermées et reste nulle dans les voies ouvertes. La définition de la matrice R est modifiée en éliminant les coefficients $A_{\bar{c}n}$ correspondant aux voies fermées [LT58]. Les équations (5.27) et (5.28) restent valables avec la matrice

\mathbf{C} remplacée par une matrice $\widetilde{\mathbf{C}}$ plus petite associée aux voies ouvertes et dont les éléments sont

$$\widetilde{C}_{cn,c'n'} = C_{cn,c'n'} - \sum_{\bar{c}\bar{c}'} V_{c\bar{c}}(ax_n)(\bar{\mathbf{C}} - E\bar{\mathbf{I}})_{\bar{c}n,\bar{c}'n'}^{-1} V_{\bar{c}'c'}(ax_{n'}), \quad (5.31)$$

où $\bar{\mathbf{C}}$ est la restriction aux voies fermées de la matrice complète \mathbf{C} . La matrice identité $\bar{\mathbf{I}}$ a la même dimension que $\bar{\mathbf{C}}$.

5.3.3 Développement en portée effective

Nous décrivons maintenant la méthode de détermination des paramètres du développement en portée effective basée sur la matrice R dans le cas d'une collision à une voie caractérisée par le moment cinétique orbital l . La matrice de collision U se réduit alors à un élément qui s'écrit $U_l = e^{2i\delta_l}$ en fonction du déphasage δ_l . En utilisant les formules (5.29) et (5.30) nous pouvons encore écrire

$$U_l = \frac{I_c(k_c a) - ka R_l(E) I'_c(k_c a)}{O_c(k_c a) - ka R_l(E) O'_c(k_c a)} \quad (5.32)$$

où la matrice R (5.28) se réduit également à un élément que nous notons $R_l(E)$ puisqu'elle dépend de l'énergie et du moment cinétique orbital. En remplaçant les fonctions coulombiennes entrante I_c et sortante O_c par les fonctions régulière F_c et irrégulière G_c (5.7), nous obtenons l'expression suivante pour le déphasage δ_l à l'énergie $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$

$$\tan \delta_l(E) = - \frac{F_l(ka) - a R_l(E) dF_l(ka)/da}{G_l(ka) - a R_l(E) dG_l(ka)/da}. \quad (5.33)$$

Nous avons laissé tomber le déphasage coulombien ω_c (5.7) car nous nous intéressons au déphasage additionnel $\delta = \delta_{total} - \omega_c$. Afin d'étudier les limites lorsque E tend vers zéro, nous devons choisir convenablement la définition des solutions asymptotiques. C'est pourquoi nous renormalisons les fonctions coulombiennes standards F_l et G_l . Nous utilisons autant que possible un formalisme identique pour les cas neutre et chargé, mais leurs comportements à basse énergie sont tout à fait différents, ce qui induit des définitions différentes. Les fonctions renormalisées \mathcal{F}_l et \mathcal{G}_l sont définies de sorte que leur limite à énergie nulle ne s'annule pas et reste finie [BB00]. Dans le cas neutre, nous introduisons les fonctions de Bessel sphériques renormalisées

$$\mathcal{F}_l(E, r) = k^{-l} r j_l(kr) \quad (5.34)$$

et

$$\mathcal{G}_l(E, r) = k^{l+1} r n_l(kr). \quad (5.35)$$

Dans le cas chargé, nous choisissons conformément à [BB00]

$$\mathcal{F}_l(E, r) = k^{-1/2} \exp(\pi\eta) F_l(kr) \quad (5.36)$$

et

$$\mathcal{G}_l(E, r) = \frac{\pi}{2} k^{-1/2} \exp(-\pi\eta) G_l(kr). \quad (5.37)$$

L'équation (5.33) se réécrit alors sous la forme unifiée

$$D_l(E) = -\frac{\mathcal{F}_l(E, a) - aR_l(E)\partial\mathcal{F}_l(E, a)/\partial a}{\mathcal{G}_l(E, a) - aR_l(E)\partial\mathcal{G}_l(E, a)/\partial a}, \quad (5.38)$$

avec D_l qui est donné par (5.8) dans le cas neutre, et par (5.9) dans le cas chargé.

Afin de déterminer les paramètres a_l , r_l , et P_l nous devons établir le comportement des différentes fonctions apparaissant dans (5.38) lorsque E tend vers zéro. Dans la suite de ce paragraphe, nous utilisons des apostrophes pour désigner les dérivées par rapport à l'énergie, et un exposant 0 pour représenter les fonctions à énergie nulle. La matrice R et ses dérivées à énergie nulle sont obtenues très simplement à partir de (5.28). Sa dérivée $j^{\text{ème}}$ s'écrit

$$R_l^{(j)0} = j! \frac{\hbar^2}{2\mu a} \sum_{n, n'=1}^N f_n(a) (C^{-j-1})_{n, n'} f_{n'}(a). \quad (5.39)$$

La matrice \mathbf{C}^{-j-1} est la $(j+1)^{\text{ème}}$ puissance de l'inverse de la matrice \mathbf{C} . Les dérivées par rapport à l'énergie des solutions asymptotiques $\mathcal{F}_l(E, r)$ et $\mathcal{G}_l(E, r)$ à énergie nulle sont données à l'annexe B dans les cas neutre et chargé. Les coefficients du développement de Taylor de $D_l(E)$ sont alors déterminés par

$$D_l(0) = -\frac{\mathcal{F}_l^0(a) - aR_l^0 d\mathcal{F}_l^0(a)/da}{\mathcal{G}_l^0(a) - aR_l^0 d\mathcal{G}_l^0(a)/da}, \quad (5.40)$$

$$D_l'(0) = -\frac{\mathcal{F}_l'^0(a) - aR_l'^0 d\mathcal{F}_l'^0(a)/da - aR_l^0 d\mathcal{F}_l'^0(a)/da}{\mathcal{G}_l^0(a) - aR_l^0 d\mathcal{G}_l^0(a)/da} - D_l(0) \frac{\mathcal{G}_l'^0(a) - aR_l'^0 d\mathcal{G}_l'^0(a)/da - aR_l^0 d\mathcal{G}_l'^0(a)/da}{\mathcal{G}_l^0(a) - aR_l^0 d\mathcal{G}_l^0(a)/da} \quad (5.41)$$

et ainsi de suite.

Nous pouvons maintenant expliciter les coefficients du développement en portée effective. Dans le cas neutre, l'équation (5.10) conduit à la longueur de diffusion

$$a_l = -D_l(0). \quad (5.42)$$

La portée effective est donnée par

$$r_l = -\frac{\hbar^2}{\mu a_l^2} D_l'(0), \quad (5.43)$$

et le paramètre de forme s'écrit

$$P_l = \frac{a_l}{4r_l} + \frac{1}{8r_l} \left(\frac{\hbar^2}{\mu a_l r_l} \right)^2 D_l''(0). \quad (5.44)$$

Dans le cas chargé, les équations (5.11) à (5.15) nous fournissent des relations équivalentes à celles de [BB00] pour la longueur de diffusion

$$a_l = -\frac{l!^2 a_N^{2l+1}}{4} D_l(0), \quad (5.45)$$

la portée effective

$$r_l = \frac{1}{3l!^2 a_N^{2l-1}} \left[1 + \frac{4p_1}{D_l(0)} - \frac{24E_N D_l'(0)}{D_l(0)^2} \right], \quad (5.46)$$

et le paramètre de forme

$$P_l = -\frac{1}{36l!^2 a_N^{2l-3} r_l^3} \left\{ \frac{3}{5} + p_1 + \frac{p_2}{D_l(0)} - \frac{24p_1 E_N D_l'(0)}{D_l(0)^2} - 72E_N^2 \left[\frac{D_l''(0)}{D_l(0)^2} - \frac{2D_l'(0)^2}{D_l(0)^3} \right] \right\}. \quad (5.47)$$

5.4 Matrice R sur réseau de Lagrange

5.4.1 Hamiltonien sur base de Lagrange

Nous analysons plus en détails les éléments de matrice $C_{cn,c'n'}$ du hamiltonien avec l'opérateur de Bloch lorsque les fonctions f_n correspondent à des fonctions de Lagrange. Nous considérons donc un réseau de Lagrange formé des N points ax_n répartis sur toute la région intérieure $[0, a]$. Les fonctions de Lagrange f_n satisfont les conditions de Lagrange

$$f_{n'}(ax_n) = (a\lambda_n)^{-1/2} \delta_{nn'}, \quad (5.48)$$

aux N points ax_n du réseau. Le facteur a est introduit dans (5.48) afin de rendre le produit $f_n(r)f_{n'}(r)dr$ sans dimension. Les fonctions de Lagrange sont toujours orthonormées à l'approximation de Gauss

$$\int_0^a f_n(r)f_{n'}(r) dr \approx \delta_{nn'}. \quad (5.49)$$

Nous explicitons maintenant les éléments de matrice des différents opérateurs dans le hamiltonien. Avec (5.19), les éléments de matrice de l'opérateur de Bloch s'écrivent

$$\int_0^a f_n(r) \mathcal{L}_c f_{n'}(r) dr = \frac{\hbar^2}{2\mu_c a} f_n(a) [a f_{n'}'(a) - B_c f_{n'}(a)] \quad (5.50)$$

où f_n' est la dérivée de f_n par rapport à r .

La matrice cinétique est, comme l'opérateur de Bloch, diagonale par rapport à l'indice de voie c . Ses éléments non nuls sont donnés en accord avec (2.4) par

$$T_{cn,cn'} = \int_0^a f_n(r) T_c f_{n'}(r) dr \approx -\frac{\hbar^2}{2\mu_c} (a\lambda_n)^{1/2} f_n''(ax_n) \quad (5.51)$$

lorsque nous les évaluons à l'aide de la règle de quadrature de Gauss.

La matrice \mathbf{C} est fortement simplifiée par l'emploi de l'approximation de Gauss. En effet, avec cette approximation et les conditions de Lagrange (5.48), la partie purement locale de la matrice potentielle devient diagonale vis-à-vis de n et n'

$$\int_0^a f_n(r) V_{cc'}(r) f_{n'}(r) dr \approx V_{cc'}(ax_n) \delta_{nn'} \quad (5.52)$$

et les termes non nuls sont très faciles à calculer. L'équation (5.52) est l'adaptation au cas des potentiels des voies c et c' et de couplage entre celles-ci, de la formule générale (2.16) définissant les éléments de matrice d'un potentiel dans le cadre de la méthode des réseaux de Lagrange. En particulier, un terme centrifuge inclus dans $V_{cc'}$, calculé avec (5.52), devient

$$T_{cn, cn'}^{lc} = \int_0^a f_n(r) \frac{\hbar^2 l_c(l_c + 1)}{2\mu_c r^2} f_{n'}(r) dr \approx \frac{\hbar^2 l_c(l_c + 1)}{2\mu_c (ax_n)^2} \delta_{nn'}. \quad (5.53)$$

Dans le cas d'un terme non-local, les éléments de matrice entre fonctions de Lagrange deviennent

$$\int_0^a f_n(r) \left(\int_0^a V_{cc'}^{nl}(r, r') f_{n'}(r') dr' \right) dr \approx (\lambda_n \lambda_{n'})^{1/2} V_{cc'}^{nl}(ax_n, ax_{n'}) \quad (5.54)$$

à l'approximation de Gauss. Bien que non diagonale, la matrice potentielle correspondante conserve la simplicité des potentiels locaux puisqu'elle ne dépend que du potentiel évalué aux points du réseau. Considérons maintenant un potentiel non-local de la forme

$$V_c^p(r, p^2) = (p^2/\mu_c) V_c^b(r) + V_c^b(r) (p^2/\mu_c) \quad (5.55)$$

agissant uniquement dans la voie c . Nous traitons ce terme, comme tous les autres, à l'approximation de Gauss, ce qui conduit aux éléments de matrice

$$\int_0^a f_n(r) V_c^{nl}(r) f_{n'}(r) dr \approx 2(T_{cn, cn'} + T_{cn, cn'}^{lc}) [V_c^b(ax_n) + V_c^b(ax_{n'})] \quad (5.56)$$

où apparaissent les éléments de matrice $T_{cn, cn'}$ de l'énergie cinétique (5.51) et $T_{cn, cn'}^{lc}$ du terme centrifuge (5.53) correspondant à la voie c . L'approximation de Gauss sur (5.56) préserve la simplicité de la méthode puisque les éléments (5.56) ont alors la même structure que les termes d'énergie cinétique.

5.4.2 Choix du réseau de Lagrange

Puisque nous travaillons sur un intervalle borné $[0, a]$, nous choisissons un réseau de Lagrange défini sur un intervalle fini. Le réseau à pas constant (2.76) ne convient pas car nous avons vu au chapitre 4 qu'il n'était pas adapté aux problèmes dans lesquels différentes valeurs du moment cinétique orbital sont couplées. Nous considérons alors le réseau de Legendre translaté sur l'intervalle $[0, 1]$ [Mal94], et le rayon de voie a nous sert également de facteur d'échelle pour étendre le réseau sur toute la région intérieure. Les N points du réseau sont

donnés par les points ax_n , où les x_n sont définis par (2.103). Nous écrivons les fonctions de Lagrange associées sous la forme

$$f_n(r) = (-1)^n a^{-1/2} \sqrt{\frac{1-x_n}{x_n}} \frac{r P_N[2(r/a) - 1]}{r - ax_n}. \quad (5.57)$$

Nous considérons les fonctions de Lagrange régularisées car les fonctions de Lagrange-Legendre translattées ne s'annulent pas à l'origine (2.105), et les potentiels présentent une singularité à l'origine lorsque le moment cinétique est non nul. Ces fonctions ne sont pas orthogonales. Leur produit scalaire vaut [VMB93]

$$\begin{aligned} \int_0^a f_n(r) f_{n'}(r) dr &= \delta_{nn'} + \frac{(-1)^{n+n'}}{2N+1} \sqrt{\frac{(1-x_n)(1-x_{n'})}{x_n x_{n'}}} \\ &\approx \delta_{nn'}. \end{aligned} \quad (5.58)$$

L'approximation de Gauss n'est donc pas très précise. Cependant la quadrature de Gauss fournit la valeur exacte des éléments de matrice de $1/r^2$ (voir la section 2.7.5). Les termes d'énergie cinétique et centrifuge sont alors évalués exactement par la règle de quadrature de Gauss et sont donnés par (5.51) et (5.53). Les expressions des dérivées des fonctions de Lagrange-Legendre translattées sont explicitées à l'annexe C.

La base des fonctions de Lagrange-Legendre (5.57) est équivalente à une base contenant les monômes r à r^N , ou encore à toute base de polynômes linéairement indépendants de degré N qui s'annulent à l'origine. De tels polynômes, conduisant à un réseau différent, peuvent être obtenus en multipliant les polynômes de Jacobi (0,2) translattés par la racine carrée de leur fonction poids. En effet la fonction poids des polynômes de Jacobi (0,2) (annexe A) se transforme après translation sur l'intervalle $[0, 1]$ en $w(x) = x^2$. Les N points ax_n du réseau sont définis à partir de

$$P_N^{(0,2)}(2x_n - 1) = 0 \quad (5.59)$$

où $P_N^{(0,2)}(2x - 1)$ est le polynôme de Jacobi (0,2) translatté de degré N (voir l'annexe A pour les propriétés des polynômes de Jacobi (α, β)). Ces polynômes sont orthogonaux sur $[0, 1]$ vis-à-vis de la fonction poids $w(x) = x^2$. Les fonctions de Lagrange correspondantes s'écrivent

$$f_n(r) = (-1)^n a^{-1/2} \sqrt{x_n(1-x_n)} \frac{r P_N^{(0,2)}(2(r/a) - 1)}{r - ax_n}, \quad (5.60)$$

où le facteur r provient de la racine carrée de la fonction poids.

Ces fonctions de base sont exactement orthogonales. Cependant, les éléments de matrice de $1/r^2$ ne sont pas bien approchés par la quadrature de Gauss. En fait, comme la fonction poids est r^2 , la quadrature de Gauss (2.21) est exacte pour certains polynômes jusqu'au degré $2N+1$ (ceux sans les termes constant et linéaire), mais n'est pas exacte pour 1 et r (voir la section A.2). Nous pouvons donc obtenir une expression exacte en soustrayant les parties

constante et linéaire de l'intégrand. L'expression restante est exactement évaluée à l'approximation de Gauss, et l'intégrale de la partie soustraite peut être effectuée simplement. Les éléments de matrice sont alors donnés par

$$\int_0^a f_n(r)r^{-2}f_{n'}(r)dr = (ax_n)^{-2}\delta_{nn'} + a^{-2}h_n(0)h_{n'}(0)\{A_{-2} + [x_n^{-1} + x_{n'}^{-1} - \frac{2}{3}N(N+3)]A_{-1}\}, \quad (5.61)$$

où les constantes $h_n(0)$, A_{-2} et A_{-1} sont données à l'annexe C. Les éléments de matrice de l'énergie cinétique ne sont pas non plus exacts, ni même précis lorsque nous utilisons l'approximation de Gauss dans (5.51). Cependant nous pouvons écrire leurs expressions exactes sous la forme

$$\int_0^a f_n(r)f_{n'}''(r)dr = (a\lambda_n)^{1/2}f_{n'}''(ax_n) + 2a^{-2}h_n(0)h_{n'}(0)[x_n^{-1} - \frac{1}{3}N(N+3)]A_{-1}, \quad (5.62)$$

avec la même procédure que pour le terme centrifuge.

5.5 Applications

5.5.1 Potentiel exponentiel

Nous utilisons le potentiel exponentiel [Lay93, MV94]

$$V(r) = -\exp(-r), \quad (5.63)$$

exactement soluble dans l'onde s , afin de comparer des calculs matrice R sur réseau de Lagrange avec des calculs matrice R "exacts", c'est-à-dire pour lesquels l'approximation de Gauss n'est pas employée. Ceci nous permet de séparer les erreurs dues à la méthode de la matrice R de celles dues à l'approximation réseau. Dans le calcul exact, la matrice potentielle, dont les éléments sont évalués par intégration numérique, est pleine, ce qui complique nettement les calculs par rapport à la méthode sur réseau de Lagrange.

Le potentiel (5.63) possède un état lié dont l'énergie E_0 est exactement donnée par l'équation [Flü71]

$$J_{\sqrt{-8E_0}}(\sqrt{8}) = 0, \quad (5.64)$$

où J_ν est une fonction de Bessel. A partir de la forme asymptotique de la solution régulière [MF53]

$$u_0(r) \propto J_{-2ik}(\sqrt{8})J_{2ik}[\sqrt{8}\exp(-r/2)] - J_{2ik}(\sqrt{8})J_{-2ik}[\sqrt{8}\exp(-r/2)], \quad (5.65)$$

nous obtenons le déphasage exact de l'onde s

$$\delta_0 = \arg[2^{-ik}\Gamma(2ik+1)J_{2ik}(\sqrt{8})]. \quad (5.66)$$

Les valeurs obtenues pour l'énergie de l'état lié par la méthode de la matrice R après quelques itérations sont indiquées au tableau 5.1 Elles sont comparées

TAB. 5.1 – Energie de l'état lié du potentiel exponentiel (5.63). Les résultats par matrice R "exacts" sont obtenus avec N fonctions de Legendre ou de Jacobi translatées.

Calcul	a	N	E_0
Exact (5.64)			-0.009 970 316 783 057
Réseau de Laguerre ($h = 0.7$ à 0.8)		40	-0.009 970 316 783 06
Matrice R , "exact"	8	14	-0.009 958
	15	20	-0.009 970 315
	30	40	-0.009 970 316 783 00
Matrice R , réseau de Legendre	15	20	-0.009 970 315
	30	40	-0.009 970 316 783 04
Matrice R , réseau de Jacobi	15	20	-0.009 970 315
	30	40	-0.009 970 316 772

avec la valeur exacte (5.64) et avec un calcul effectué sur le réseau de Laguerre (comme au chapitre 4). L'énergie exacte est reproduite avec une précision de 10^{-14} avec $N = 40$ zéros de Laguerre (h correspond au facteur d'échelle). La méthode de la matrice R "exacte" avec les bases équivalentes de Legendre ou de Jacobi est capable de fournir une précision similaire si a est suffisamment grand. Pour $a = 8$, cependant, la grande extension spatiale de l'état faiblement lié réduit la précision à environ 0.1%. Augmenter a nécessite une augmentation de la taille de la base afin de couvrir convenablement la région intérieure.

Lorsque l'approximation de Gauss est utilisée, la précision obtenue avec le réseau de Legendre reste presque identique à celle du calcul matrice R original, malgré sa simplicité. Pour une précision fixée, la taille requise est proche de celle du réseau de Laguerre. Dans le cas du réseau de Jacobi, l'utilisation de l'approximation de Gauss sur l'énergie cinétique conduit à des résultats peu précis, probablement à cause de l'imprécision de cette approximation sur les termes constant et linéaire. La nécessité d'utiliser les éléments de matrice cinétique exacts (5.62) ne constitue qu'un léger inconvénient car ils sont disponibles et restent valables quel que soit le potentiel. Lorsque la matrice cinétique est évaluée exactement, les résultats sont similaires à ceux du réseau de Legendre pour $a = 15$ et $N = 20$, mais moins bons pour $a = 30$ et $N = 40$. Ceci est apparemment relié à une perte de précision dans le calcul des zéros de Jacobi lorsque N augmente. Ceux-ci sont calculés en utilisant les sous-routines de la bibliothèque NAG.

Au tableau 5.2 sont repris les résultats des déphasages obtenus pour $l = 0$ à différentes énergies. Le calcul sur réseau de Jacobi est effectué avec l'expression exacte de l'énergie cinétique (5.62). Ici aussi lorsque l'approximation de Gauss est utilisée, la précision des déphasages est faible. De la même façon, lorsque l est non nul, le terme centrifuge est calculé exactement avec (5.61). Lorsque l est égal à zéro, le choix du rayon de voie $a = 8$, utilisé dans [Lay93, MV94], limite la précision sur le déphasage comme pour l'énergie de l'état lié. Les résultats obtenus avec $N = 10$ fonctions de base pour la basse énergie $E =$

TAB. 5.2 – Déphasages $l = 0$ (en degrés) pour le potentiel exponentiel calculés exactement avec (5.66) et avec différentes approximations.

E	Exact (5.66)	a	N	Matrice R	Legendre	Jacobi
0.1	73.666 312 4	8	10	73.607	73.606	73.607
		10	10	73.663 9	73.663 2	73.662 1
		10	15	73.664 6	73.664 6	73.664 6
		15	15	73.666 3	73.666 0	73.666 2
		15	20	73.666 26	73.666 26	73.666 26
		20	20	73.666 309	73.666 316	73.666 311
1	34.580 659 7	10	15	34.579	34.579	34.579
		15	15	34.45	34.44	34.46
		15	20	34.580 65	34.580 65	34.580 65
10	12.517 133 8	10	30	12.510	12.510	12.512
		10	40	12.516 5	12.516 5	12.516 5
		15	30	10.1	10.4	47.2
		15	40	12.37	12.37	12.42
		15	50	12.517 130	12.517 130	12.517 130

0.1 ne peuvent pas être améliorés en agrandissant la base. L'erreur due à l'approximation réseau est plus petite que celle due au choix de a . Cet effet est illustré par les résultats obtenus avec $a = 10$, qui améliore la précision en gardant la même taille de base. A nouveau il n'y a aucun intérêt à ne pas utiliser l'approximation réseau. Une excellente précision est déjà obtenue pour $a = 15$, mais avec une base plus grande ($N \geq 15$) nécessaire pour couvrir une plus grande région intérieure. Aux plus hautes énergies $E = 1$ et 10, de très bonnes précisions sont obtenues avec le même rayon de voie. Bien entendu le nombre de fonctions de base doit être augmenté afin de reproduire les oscillations supplémentaires de la fonction d'onde. A $E = 10$, par exemple, la précision est encore faible avec $a = 15$ et $N = 30$. Avec $N = 40$, le résultat pour $a = 15$ n'est pas aussi bon que celui pour $a = 10$ obtenu avec $N = 30$. Une forte amélioration se produit avec $N = 50$. Dans tous les cas, les résultats sur réseau de Lagrange sont aussi précis que ceux du calcul matrice R "exact". Changer de réseau n'introduit pas de grande différence.

Les déphasages pour $l = 2$ et $l = 4$ sont présentés au tableau 5.3. Nous ne disposons pas de valeurs exactes dans ces cas, mais la convergence peut être examinée en augmentant la taille N de la base, ou autrement dit du réseau de Lagrange. Nous utilisons donc les résultats obtenus avec $a = 20$ et $N = 60$ comme référence. Les commentaires sont essentiellement similaires à ceux pour $l = 0$, mais avec une augmentation progressive des rayons de voie et des tailles de base. En particulier, l'erreur sur l'approximation réseau reste petite par rapport à l'erreur due à la matrice R .

Ces différents résultats nous indiquent que les deux réseaux de Lagrange fournissent le même degré de précision que le calcul matrice R "exact". Le calcul sur réseau de Lagrange simplifie tous les calculs sans perte de précision

TAB. 5.3 – Déphasages $l = 2$ et $l = 4$ (en degrés) pour le potentiel exponentiel calculés avec une grande précision ($a = 20$ and $N = 60$) et avec différentes approximations.

E	$N = 60$	a	N	Matrice R	Legendre	Jacobi
$l = 2$						
0.1	2.098 164	10	10	2.091 5	2.091 5	2.091 5
		15	10	2.098 09	2.098 10	2.098 06
		15	15	2.098 10	2.098 10	2.098 10
		20	20	2.098 164	2.098 164	2.098 164
1	14.116 269	10	15	14.114 7	14.114 7	14.114 7
		15	20	14.116 26	14.116 26	14.116 26
10	10.231 106	10	30	10.225	10.225	10.226
		10	40	10.230 5	10.230 5	10.230 5
		15	40	10.09	10.09	10.14
		15	50	10.231 10	10.231 10	10.231 10
$l = 4$						
0.1	0.052 356	15	10	0.052 30	0.052 30	0.052 30
		20	20	0.052 356	0.052 356	0.052 356
1	4.277 519	15	15	4.21	4.21	4.21
		15	20	4.277 509	4.277 509	4.277 509
10	7.686 981	15	40	7.57	7.575	7.60
		15	50	7.686 94	7.686 94	7.686 94

significative. La comparaison des réseaux de Legendre et de Jacobi conduit à une information importante sur les conditions de validité de la méthode des réseaux de Lagrange. La condition d'orthogonalité imposée sur la base de Lagrange dans certains travaux antérieurs [BH86, VMB93], ne semble pas nécessaire. En effet, bien que les fonctions de Lagrange-Legendre régularisées ne sont pas exactement orthogonales, le réseau de Legendre fournit des résultats précis. Ceci a déjà été observé au chapitre 4 sur les bons résultats du réseau de Laguerre régularisé, dont les fonctions de Lagrange associées ne sont pas orthogonales. De son côté, la base orthogonale de Lagrange-Jacobi conduit à une précision équivalente, mais nécessite des expressions plus compliquées pour les éléments de matrice de l'énergie cinétique. L'approximation de Gauss appliquée au produit scalaire des fonctions de Lagrange-Legendre ne semble pas précise (5.58). Cependant ces fonctions font intervenir des polynômes en r et le produit scalaire n'est pas exact à l'approximation de Gauss parce que le degré polynomial de l'intégrant est trop grand d'une unité, comme dans le cas des fonctions régularisées du réseau de Laguerre. Néanmoins les conditions requises pour qu'une base de fonctions de Lagrange non orthogonale fournisse des résultats très précis, doivent encore être établies. Puisque le réseau de Jacobi n'apporte aucune amélioration des résultats par rapport au réseau de Legendre, tous les calculs matrice R sur réseau de Lagrange présentés dans la suite sont basés sur le réseau de Legendre.

Les coefficients du développement en portée effective pour le potentiel exponentiel (5.63), calculés sur réseau de Legendre dans les cas d'un moment cinétique $l = 0$ et $l = 1$, sont repris au tableau 5.4. Le déphasage de l'onde s

TAB. 5.4 – Coefficients du développement en portée effective pour le potentiel exponentiel, calculés sur réseau de Legendre dans les cas $l = 0$ et $l = 1$.

a	N	a_l	r_l	P_l
$l = 0$				
Exact		8.693 254 331 840	2.605 256 570 229	0.027 974 454 552
10	15	8.693 8	2.607	0.026
15	15	8.693 3	2.605 32	0.027 995
20	25	8.693 254 9	2.605 256 9	0.027 975 8
25	35	8.693 254 334	2.605 256 566	0.027 974 460
$l = 1$				
15	15	-6.357	1.193	-1.02
20	25	-6.361 05	1.202 6	-0.949
25	30	-6.361 138	1.202 94	-0.944 9
30	40	-6.361 140	1.202 95	-0.944 8

étant connu analytiquement (5.66), il est possible d'en déduire les coefficients du développement en portée effective dans ce cas. La longueur de diffusion a_0 est par exemple donnée par [MF53]

$$a_0 = \ln(2) + 2\gamma - \pi \frac{N_0(\sqrt{8})}{J_0(\sqrt{8})} \quad (5.67)$$

$$= 8.693\,254\,331\,840 \quad (5.68)$$

où γ est la constante d'Euler, et J_0 et N_0 sont les fonctions de Bessel de première et seconde espèce. La portée effective r_0 et le paramètre de forme P_0 s'écrivent quant à eux sous une forme plus compliquée que nous n'explicitons pas ici. Nous avons évalué ceux-ci numériquement à l'aide du programme Mathematica, ce qui nous fournit

$$r_0 = 2.605\,256\,570\,229 \quad (5.69)$$

$$P_0 = 0.027\,974\,454\,552. \quad (5.70)$$

En plaçant la frontière a à 10, un réseau de Legendre de 15 points nous fournit une précision de l'ordre de 10^{-3} sur les trois paramètres a_0 , r_0 et P_0 . L'amélioration de ces valeurs nécessite une augmentation du rayon de voie, comme l'illustre le calcul avec $a = 15$ et $N = 15$ pour lequel l'erreur sur les trois coefficients est réduite à environ 10^{-4} . La précision peut encore être améliorée en choisissant un rayon de voie $a = 20$, ce qui nous donne une erreur de 10^{-7} , ou $a = 25$ pour une erreur d'environ 10^{-9} . Bien entendu cette augmentation de a doit aller de pair avec l'agrandissement de la taille N de la base de Lagrange, afin de couvrir correctement la région intérieure. Néanmoins le nombre de fonctions de Lagrange-Legendre requis reste raisonnable, et vaut $N = 25$ pour $a = 20$ et $N = 35$ pour $a = 25$.

Dans le cas de l'onde p ($l = 1$), nous ne disposons pas de valeurs exactes pour les coefficients du développement en portée effective. Nous pouvons cependant examiner la convergence des résultats en fonction du rayon de voie a et de la taille N de la base. La présence de la barrière centrifuge nécessite un plus grand rayon de voie que dans le cas de l'onde s , et ralentit également la convergence. Avec $a = 15$ et $N = 15$, l'erreur sur la longueur de diffusion a_1 et la portée effective r_1 est d'environ 10^{-2} , et celle sur le paramètre de forme P_1 est de l'ordre de 0.1. La précision peut être améliorée en augmentant le rayon de voie et simultanément la taille de la base. Cependant nous n'atteignons pas aussi facilement des précisions de l'ordre de $10^{-7} - 10^{-9}$ comme dans le cas de l'onde s . En effet avec $a = 30$ et $N = 40$, les erreurs sur a_1 , r_1 et P_1 valent respectivement environ 10^{-6} , 10^{-5} et 10^{-4} , le paramètre de forme étant le coefficient qui converge le plus lentement. Même si elle n'est pas aussi spectaculaire que pour l'onde s , la précision obtenue sur les coefficient du développement en portée effective dans l'onde p reste très bonne.

5.5.2 Potentiel de Yamaguchi

Le potentiel de Yamaguchi [Yam54, vD89], qui est un potentiel non local séparable, s'écrit

$$V(r, r') = -v(r)v(r') \quad (5.71)$$

où $v(r)$ est donné par

$$v(r) = \sqrt{2\beta(\alpha + \beta)}e^{-\beta r}, \quad (5.72)$$

α et β étant deux paramètres ($\beta > 0$). Pour les calculs numériques nous choisissons les valeurs suivantes

$$\alpha = 3, \quad (5.73)$$

$$\beta = 5. \quad (5.74)$$

L'équation de Schrödinger avec le potentiel de Yamaguchi est exactement soluble dans l'onde s . Ce potentiel admet un état lié, dont l'énergie est donnée par

$$E = -\alpha^2 = -9. \quad (5.75)$$

Le déphasage δ_0 pour l'onde s peut quant à lui se mettre exactement sous la forme du développement en portée effective (5.10)

$$k \cotan \delta_0 = -\frac{1}{a_0} + \frac{1}{2}r_0k^2 - P_0r_0^3k^4 \quad (5.76)$$

où les coefficients a_0 , r_0 et P_0 s'écrivent

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{2(\alpha + \beta)^2}{\alpha\beta(\alpha + 2\beta)}, \\ r_0 &= \frac{2\beta}{(\alpha + \beta)^2} + \frac{1}{\beta}, \\ P_0r_0^3 &= -\frac{1}{2\beta(\alpha + \beta)^2}. \end{aligned} \quad (5.77)$$

L'erreur sur l'énergie de l'état lié (5.75) obtenue par la méthode de la matrice R après quelques itérations vaut $3 \cdot 10^{-5}$ en utilisant un rayon de voie $a = 5$ et seulement $N = 15$ points de réseau. Cette erreur est réduite à 10^{-12} en augmentant la taille du réseau jusqu'à $N = 25$ points, avec le même rayon de voie.

Au tableau 5.5 sont repris les résultats pour les coefficients du développement en portée effective. La première ligne reprend les valeurs exactes de ces paramètres (5.77). Nous ne présentons pas de résultats pour les déphasages cal-

TAB. 5.5 – Coefficients du développement en portée effective pour le potentiel de Yamaguchi, calculés sur réseau de Legendre pour l'onde s .

a	N	a_0	r_0	P_0
Exact		0.656 410 256 411	0.356 25	-0.034 558 541 629
5	10	0.654	0.355 6	-0.034 9
	15	0.656 409 9	0.356 249 9	-0.034 558 52
	20	0.656 410 256	0.356 250 001	-0.034 558 48

culés directement à certaines énergies, puisque ceux-ci peuvent être déterminés à toute énergie dès que les trois coefficients a_0 , r_0 et P_0 sont connus (5.76). Avec un rayon de voie $a = 5$, nous obtenons déjà une erreur absolue inférieure à 0.01 sur les trois paramètres a_0 , r_0 et P_0 avec seulement $N = 10$ points. Cette

précision est améliorée en augmentant la valeur de N . Avec $N = 20$, l'erreur est inférieure à 10^{-9} pour a_0 , et vaut environ 10^{-8} pour r_0 et 10^{-7} pour P_0 . Les résultats correspondant à $N = 20$ nous indiquent que la plus petite erreur obtenue sur la valeur de P_0 avec $N = 15$ est quelque peu fortuite, les dernières décimales n'étant pas encore stabilisées.

5.5.3 Collision nucléon-nucléon

Dans cette section nous utilisons la méthode de la matrice R sur réseau de Lagrange pour étudier le système nucléon-nucléon avec trois potentiels d'interaction : le potentiel de Reid régulier ("soft core"), le potentiel de Paris et le potentiel de Bonn. Le potentiel de Reid [RJ68] est un potentiel purement local présentant un terme central, un terme de spin-orbite et un terme tensoriel couplant certaines voies, avec des dépendances spatiales de type Yukawa. Les potentiels de Paris [LLR⁺80] et de Bonn [MHE87] présentent quant à eux une dépendance en l'énergie par l'intermédiaire de l'opérateur p^2 induisant la non-localité de ces potentiels. Ils peuvent s'écrire sous la forme

$$V(r, p^2) = V_0(r, p^2)\Omega_0 + V_1(r, p^2)\Omega_1 + V_{LS}(r)\Omega_{LS} + V_T(r)\Omega_T + V_{SO2}(r)\Omega_{SO2} \quad (5.78)$$

avec

$$\Omega_0 = \frac{1 - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2}{4} \quad (5.79)$$

$$\Omega_1 = \frac{3 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2}{4} \quad (5.80)$$

$$\Omega_{LS} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (5.81)$$

$$\Omega_T = 3 \frac{\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r} \boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}}{r^2} - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \quad (5.82)$$

$$\Omega_{SO2} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{L} \boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{L} + \boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{L} \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{L}) \quad (5.83)$$

où $\boldsymbol{\sigma}_i = 2\mathbf{s}_i$, \mathbf{s}_i étant le spin du nucléon i , $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$ est le spin total et \mathbf{L} est le moment cinétique orbital total des deux nucléons. Contrairement au potentiel de Paris, le potentiel de Bonn ne contient pas de terme $SO2$. Les paramètres du potentiel de Paris sont donnés dans [LLR⁺80]. Pour le potentiel de Bonn, nous utilisons les paramètres définis dans [MHE87]. En particulier ces deux potentiels n'ont pas été ajustés sur les mêmes données expérimentales : le potentiel de Bonn est ajusté pour reproduire les déphasages de la collision neutron-proton [MHE87], alors que le potentiel de Paris reproduit les déphasages de la collision proton-proton [LLR⁺80].

Pour le potentiel de Reid, nous utilisons les unités $\hbar^2/2\mu = 41.47$ MeV fm² [RJ68], tandis que pour les potentiels réalistes de Paris et de Bonn, nous reprenons la masse réduite du système nucléon-nucléon [AW93]. Le potentiel coulombien est dans tous les cas le potentiel pur en $1/r$, avec $e^2 = 1, 4399$ MeV fm.

Au tableau 5.6 sont indiqués les déphasages obtenus avec les potentiels de Reid, de Paris et de Bonn pour l'onde non couplée 1S_0 des collisions neutron-proton (np) et proton-proton (pp). Nous avons vérifié que ces déphasages sont

TAB. 5.6 – Déphasages (en degrés) pour l'onde 1S_0 pour les collisions np et pp avec les potentiels de Reid, de Paris et de Bonn, par la méthode de la matrice R sur réseau de Legendre translaté.

Potentiel	E (MeV)	a	N	$\delta(^1S_0)_{np}$	a	N	$\delta(^1S_0)_{pp}$	
Reid	1	8	20	59.486	8	20	45.740	
		10	30	59.400	10	30	45.693	
		12	40	59.400	12	40	45.699	
	10	8	20	51.411	8	20	51.244	
		10	25	51.352	10	30	51.210	
		10	30	51.376				
	100	8	20	5.813	8	20	6.554	
		10	25	5.757	10	30	6.518	
		10	30	5.776				
	Paris	1	10	30	59.44	10	30	45.73
			10	40	59.67	10	40	45.93
			20	80	59.67	20	80	45.94
10		10	30	50.93	10	30	50.71	
		10	40	51.03	10	40	50.80	
		20	80	51.03	20	80	50.81	
100		10	30	4.77	10	30	5.53	
		10	40	4.83	10	40	5.59	
		20	80	4.83	20	80	5.59	
Bonn		1	8	20	64.397	8	20	49.863
			10	25	64.602	10	25	50.087
			10	30	64.572	12	30	50.067
	20		60	64.573	20	60	50.066	
	10	8	20	54.172	8	20	53.875	
		10	25	54.261	10	25	53.966	
		10	30	54.249	10	30	53.954	
		20	60	54.249	20	60	53.954	
	100	8	20	8.741	8	20	9.458	
		10	25	8.799	10	25	9.517	
		10	30	8.790	10	30	9.507	
		20	60	8.790	20	60	9.508	

en accord avec les valeurs données dans les références [RJ68, LLR⁺80, MHE87] des trois potentiels.

Dans le cas du potentiel de Reid, nous pouvons comparer les déphasages obtenus avec les résultats d'un calcul par différences finies effectué à l'aide d'un algorithme de Numérov [Ray81]. Ces déphasages de référence sont obtenus en utilisant 2000 points de discrétisation et un pas de 0.01 fm, ce qui nous fournit une précision meilleure que 0.001 degrés, et sont repris au tableau 5.7. Dans

TAB. 5.7 – Déphasages (en degrés) pour l'onde 1S_0 pour les collisions np et pp calculés par différences finies, avec 2000 points de discrétisation et un pas de 0.001 fm, pour le potentiel de Reid.

E (MeV)	$\delta(^1S_0)_{np}$	$\delta(^1S_0)_{pp}$
1	59.400	45.6990
10	51.376	51.210
100	5.776	6.518

le cas de la méthode de la matrice R sur réseau de Lagrange avec le potentiel de Reid, des résultats raisonnables sont déjà obtenus avec $N = 20$ points et $a = 8$ fm. La précision est alors de l'ordre de 0.1 degrés pour $E = 1$ MeV et légèrement inférieure pour $E = 10$ et 100 MeV. Ce choix est suffisamment bon pour de nombreuses applications. La même précision nécessite dans le cas de différences finies environ 150 points équidistants. Une augmentation de a améliore les résultats mais au prix d'une augmentation du nombre de points de réseau. Avec $a = 10$ fm et $N = 30$ la précision est inférieure à 0.001 degrés pour les collisions np et pp aux trois énergies considérées, sauf à $E = 1$ MeV dans la collision pp , où l'erreur est inférieure à 0.01 degrés. Dans ce dernier cas une précision inférieure à 0.001 degrés nécessite un rayon de voie de 12 fm et $N = 40$ points.

Dans les cas des potentiels de Paris et de Bonn, nous ne disposons pas de résultats par différences finies pouvant servir de référence. Pour le potentiel de Paris, nous utilisons donc un calcul avec $a = 20$ fm et $N = 80$ points comme référence. Les déphasages obtenus avec ce potentiel convergent beaucoup plus lentement que dans le cas du potentiel de Reid. De plus grandes bases de Lagrange sont donc nécessaires. Néanmoins, même avec des réseaux de Lagrange contenant beaucoup de points, nous n'obtenons pas de déphasage avec une précision de l'ordre de 0.001 degrés. Ceci n'est pas gênant puisque de telles précisions ne sont pas nécessaires dans les applications pratiques. Cette lente convergence des résultats est due à la structure du potentiel de Paris, et en particulier de la partie non locale de celui-ci. Toutefois, avec un rayon de voie $a = 10$ fm, nous obtenons une précision sur les déphasages de l'onde 1S_0 de l'ordre de 0.1 degrés avec $N = 30$ points, pour les collisions np et pp aux trois énergies $E = 1, 10$ et 100 MeV. Cette précision peut être améliorée simplement en augmentant la taille du réseau jusqu'à $N = 40$, et devient alors égale à environ 0.01 degrés.

Bien que le potentiel de Bonn présente également une non-localité, la

convergence des déphasages est dans ce cas plus rapide qu'avec le potentiel de Paris. De plus petits nombres N de points de réseau suffisent donc pour obtenir une précision fixée. Nous considérons un calcul sur réseau de Lagrange avec $a = 20$ fm et $N = 60$ comme point de référence. Comme pour le potentiel de Reid, un rayon de voie $a = 8$ fm et $N = 20$ points nous fournissent déjà une précision de l'ordre de 0.1 degrés pour les déphasages 1S_0 des collisions np et pp . L'amélioration de ces résultats requiert une augmentation de a : avec $a = 10$ fm et $N = 25$ points, nous obtenons une précision d'environ 0.01 degrés aux trois énergies considérées. Augmenter la taille N du réseau jusqu'à $N = 30$ permet encore de réduire l'erreur sur les déphasages, la précision devenant inférieure à 0.001 degrés, sauf à $E = 1$ MeV pour la collision pp . Dans ce cas une précision de 0.001 degrés nécessite également une légère augmentation de a à 12 fm. Les déphasages obtenus ne sont pas exactement identiques avec les deux potentiels réalistes de Paris et de Bonn, puisque ceux-ci n'ont pas été ajustés sur les mêmes données expérimentales, comme expliqué précédemment.

Nous considérons maintenant la collision np en voies couplées $^3S_1 - ^3D_1$, qui correspond à la structure du deuton. Nous pouvons utiliser la procédure itérative pour déterminer l'énergie de liaison du deuton. Après quelques itérations, nous obtenons une énergie pour le deuton de -2.22460 MeV avec $a = 15$ fm et $N = 50$ pour le potentiel de Reid, de -2.22472 MeV et -2.22466 MeV avec $a = 12$ fm et $N = 40$ respectivement pour les potentiels de Paris et de Bonn. Lorsque nous augmentons a et N seule la dernière décimale est modifiée. Ces résultats sont en bon accord avec les valeurs pour cette énergie données dans les références des trois potentiels [RJ68, LLR⁺80, MHE87].

Les déphasages principaux et le paramètre de couplage pour les voies couplées $^3S_1 - ^3D_1$, calculés sur réseau de Lagrange, sont donnés au tableau 5.8 pour trois énergies. Il faut noter que nous utilisons ici la paramétrisation de la matrice de collision telle qu'employée dans les références [RJ68, LLR⁺80, MHE87] des potentiels nucléaires. La matrice de collision est alors définie en fonction des déphasages principaux δ_1 et δ_2 et du paramètre de couplage ϵ selon [SYM57]

$$U = \begin{pmatrix} e^{i\delta_1} & 0 \\ 0 & e^{i\delta_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos 2\epsilon & i \sin 2\epsilon \\ i \sin 2\epsilon & \cos 2\epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\delta_1} & 0 \\ 0 & e^{i\delta_2} \end{pmatrix}. \quad (5.84)$$

Cette paramétrisation diffère de celle utilisée dans l'article [HSvRB98], qui correspond à une formulation mathématique de la matrice de collision due à Blatt et Biedenharn [BB52]. La paramétrisation définie par (5.84) est par contre plus physique. En effet le paramètre de couplage ϵ a dans ce cas une interprétation simple : il donne les proportions dans lesquelles un faisceau incident dans la voie d'entrée se divise entre les deux voies de sortie. Il est donc une mesure du degré de non-conservation du moment cinétique orbital. De plus, avec la paramétrisation (5.84), les déphasages totaux s'obtiennent simplement en ajoutant aux déphasages nucléaires δ_1 et δ_2 le déphasage coulombien, alors que le lien entre les déphasages nucléaires obtenus avec la paramétrisation de Blatt-Biedenharn, et les déphasages totaux prend une forme plus compliquée [SYM57].

TAB. 5.8 – Déphasages principaux et paramètre de couplage (en degrés) pour la collision np dans les ondes partielles couplées ${}^3S_1 - {}^3D_1$ par la méthode de la matrice R sur réseau de Legendre translaté.

Potentiel	E (MeV)	a	N	δ_S	δ_D	ϵ
Reid	1	8	20	-43.38	-0.022	-0.29
		10	30	-43.323	-0.025	-0.271
		15	40	-43.313	-0.027	-0.257
	10	8	20	86.23	-2.17	1.74
		10	30	86.268	-2.206	1.692
	100	8	20	18.55	-19.110	5.70
10		30	18.580	-19.113	5.676	
Paris	1	10	20	-43.56	-0.024	-0.27
		12	40	-43.62	-0.026	-0.26
		20	80	-43.62	-0.027	-0.25
	10	10	20	85.94	-2.16	1.57
		10	40	85.88	-2.16	1.58
		20	80	85.88	-2.16	1.58
	100	10	20	19.29	-20.42	3.18
		10	40	19.24	-20.43	3.21
		20	80	19.24	-20.43	3.21
Bonn	1	8	20	-43.664	-0.022	-0.285
		10	25	-43.583	-0.0250	-0.260
		15	35	-43.588	-0.0276	-0.245
		20	60	-43.585	-0.0278	-0.244
	10	8	20	85.883	-2.163	1.375
		10	25	85.951	-2.206	1.322
		10	30	85.940	-2.206	1.323
		20	60	85.941	-2.209	1.325
	100	8	20	19.456	-21.268	-0.335
		10	25	19.515	-21.267	-0.366
		10	30	19.505	-21.268	-0.362
		20	60	19.505	-21.269	-0.364

Dans le cas du potentiel de Reid, nous nous comparons à nouveau à un calcul par différences finies. Les valeurs de référence des déphasages sont indiquées au tableau 5.9, et correspondent toujours à 2000 points de discrétisation et à un pas de 0.001 fm. Les commentaires effectués sur les déphasages 1S_0

TAB. 5.9 – Déphasages principaux et paramètre de couplage (en degrés) pour les collisions en voies couplées np $^3S_1 - ^3D_1$ et pp $^3P_2 - ^3F_2$ calculés par différences finies. Les conditions de calculs sont 2000 points de discrétisation et un pas de 0.01 fm pour $^3S_1 - ^3D_1$ et 700 points et un pas de 0.02 fm pour $^3P_2 - ^3F_2$.

E (MeV)	δ_S	δ_D	ϵ	δ_P	δ_F	ϵ
1	-43.313	-0.027	-0.255	0.040	0.00009	-0.006
10	86.270	-2.209	1.693	1.667	0.064	-0.585
100	18.581	-19.114	5.674	15.750	1.263	-2.989

pour le potentiel de Reid sont encore valables dans ce cas-ci : un rayon de voie $a = 8$ fm et $N = 20$ points fournissent une précision d'environ 0.1 degrés sur les déphasages principaux et sur le paramètre de couplage. L'augmentation de a et N ($a = 10$ fm et $N = 30$) améliore la précision, qui devient alors excellente (environ 0.001 degrés), sauf pour $E = 1$ MeV, où une telle précision requiert un rayon de voie de 15 fm et $N = 40$ points de réseau.

Dans le cas du potentiel de Paris, la convergence est toujours ralentie à cause du terme non local. Un calcul avec $a = 20$ fm et $N = 80$ points nous sert de référence. Les commentaires sont essentiellement les mêmes que pour les déphasages 1S_0 . Pour $E = 1$ MeV, l'obtention d'une précision de l'ordre de 0.01 degrés nécessite cependant un rayon de voie plus grand ($a = 12$ fm) que pour le déphasage 1S_0 .

Dans le cas du potentiel de Bonn également, les commentaires sur le déphasage 1S_0 sont encore d'application pour la collision $^3S_1 - ^3D_1$, sauf pour $E = 1$ MeV. A cette énergie la convergence des déphasages est légèrement plus lente que dans le cas de l'onde 1S_0 . Un plus grand rayon de voie $a = 15$ fm et par conséquent un plus grand réseau $N = 35$ sont nécessaires pour obtenir une précision de l'ordre de 0.001 degrés sur les deux déphasages principaux et sur le coefficient de couplage. Cependant avec $a = 8$ fm et $N = 20$ points, nous obtenons toujours une bonne précision de l'ordre de 0.1 degrés.

Nous avons également calculé les déphasages en voies couplées $^3P_2 - ^3F_2$ pour la collision pp . Les résultats sont donnés au tableau 5.10 pour les trois potentiels. Dans le cas du potentiel de Reid, les valeurs de référence de ces déphasages, obtenues par un calcul par différences finies avec 700 points de discrétisation et un pas de 0.02 fm, sont indiquées au tableau 5.9. La situation est quelque peu modifiée par rapport à la collision $^3S_1 - ^3D_1$ à cause de la force coulombienne et/ou des barrières centrifuges plus élevées. De bons résultats sont obtenus avec de plus petites valeurs de N . Cependant, aux basses énergies, le rayon de voie doit être choisi plus grand. La méthode des différences finies converge également plus difficilement dans ce cas-ci. La valeur de ϵ n'est pas

TAB. 5.10 – Déphasages principaux et paramètre de couplage (en degrés) pour la collision pp dans les ondes partielles couplées ${}^3P_2 - {}^3F_2$ par la méthode de la matrice R sur réseau de Legendre translaté.

Potentiel	E (MeV)	a	N	δ_P	δ_F	ϵ
Reid	1	8	15	0.043	0.00003	-0.004
		10	20	0.041	0.00006	-0.005
		15	20	0.040	0.00009	-0.006
	10	8	15	1.667	0.052	-0.584
		10	20	1.667	0.062	-0.590
		15	20	1.667	0.064	-0.585
	100	8	15	15.742	1.261	-2.993
		10	20	15.748	1.263	-2.988
		12	25	15.750	1.263	-2.987
Paris	1	10	20	0.048	0.00006	-0.0056
		15	30	0.047	0.00010	-0.0068
		20	80	0.047	0.00011	-0.0069
	10	10	20	1.809	0.068	-0.639
		15	30	1.813	0.071	-0.633
		20	80	1.805	0.071	-0.633
	100	10	30	16.50	1.097	-2.755
		12	50	16.26	1.098	-2.765
		20	80	16.29	1.098	-2.763
Bonn	1	10	20	0.0420	0.00006	-0.0054
		15	30	0.0409	0.00009	-0.0065
		20	60	0.0409	0.00010	-0.0066
	10	10	20	1.6993	0.0664	-0.645
		15	30	1.6993	0.0687	-0.640
		20	60	1.6993	0.0688	-0.640
	100	8	20	15.766	1.331	-3.215
		10	30	15.765	1.332	-3.211
		20	60	15.765	1.333	-3.210

aussi précise que les autres résultats par différences finies. Le déphasage δ_F et le paramètre de couplage ϵ étant très petits à 1 MeV, le rayon de voie a doit être plus grand que 15 fm afin de fournir des valeurs correctes pour ces deux paramètres. Par contre, à 100 MeV, une très bonne précision est obtenue avec seulement $N = 20$ points et $a = 10$ fm.

Avec le potentiel de Paris, le rayon de voie doit également être choisi plus grand aux basses énergies car le déphasage δ_F et le paramètre de couplage ϵ sont très faibles. Avec $a = 15$ fm et $N = 30$ points, la précision à 1 MeV est déjà inférieure à 0.001 degrés. Un rayon de voie $a = 10$ fm nous fournit une précision de l'ordre de 0.1 degrés aux énergies $E = 10$ MeV et 100 MeV avec respectivement $N = 20$ et 30 points. Ces résultats peuvent être améliorés en augmentant a et N . Pour $E = 100$ MeV, une précision de l'ordre de 0.01 degrés est obtenue avec $a = 12$ fm et $N = 50$ points, ceux-ci étant requis pour reproduire les cinq oscillations de la fonction d'onde.

Dans le cas du potentiel de Bonn, pour une précision fixée, le rayon de voie doit être augmenté par rapport au cas de l'onde 1S_0 , sauf lorsque $E = 100$ MeV. Pour les trois énergies considérées, une taille de réseau $N = 30$ est suffisante pour obtenir une précision de l'ordre de 0.001 degrés, avec un rayon de voie dépendant de E ($a = 15$ fm pour $E = 1$ MeV et $E = 10$ MeV, et 10 fm pour $E = 100$ MeV).

Le tableau 5.11 reprend les résultats obtenus avec les trois potentiels nucléon-nucléon pour les coefficients du développement en portée effective. Les collisions np et pp sont considérées. Du fait de la présence d'un terme tensoriel dans les trois potentiels, l'onde 3S_1 est couplée avec 3D_1 , et la matrice R est alors calculée en voies couplées. Dans le cas du potentiel de Reid, de bons résultats sont déjà obtenus avec $a = 12$ fm. La convergence du paramètre de forme est cependant plus lente en fonction de a . Ceci est relié aux dérivées successives de la fonction d'onde par rapport à l'énergie qui s'étendent sur un domaine spatial de plus en plus grand. L'obtention d'un paramètre de forme précis nécessite donc une région intérieure plus large que pour la longueur de diffusion et la portée effective. Les résultats sont en bon accord avec ceux de Reid [RJ68] obtenus à partir de trois déphasages à basse énergie, et indiqués au tableau 5.12.

Pour le potentiel de Paris, pour les ondes S , le rayon de voie peut être choisi égal à 15 fm ou plus. De plus grandes valeurs sont nécessaires pour les ondes P . Des nombres de points de réseau plus élevés que pour le potentiel de Reid sont requis pour obtenir des résultats stables. Néanmoins ceux-ci sont obtenus avec des nombres de points de l'ordre de 60 pour les ondes S et 40 pour les ondes P . La convergence du paramètre de forme par rapport à a est cependant assez lente pour les raisons données plus haut. Des valeurs précises de ce paramètre nécessitent d'augmenter a et donc N . Nos résultats sont en accord avec ceux de [LLR⁺80], repris au tableau 5.12. Il faut noter que nos valeurs pour 1S_0 np doivent être comparées avec les valeurs nn de cette référence malgré une légère différence de masse. La longueur de diffusion 1S_0 np avec ce potentiel n'est pas en bon accord avec la valeur expérimentale car le potentiel est ajusté sur la collision pp .

Dans le cas du potentiel de Bonn, des commentaires similaires à ceux pour

TAB. 5.11 – Coefficients du développement en portée effective calculés à l’aide de la méthode de la matrice R sur réseau de Lagrange pour les potentiels nucléon-nucléon de Reid (“soft core”), de Paris et de Bonn.

Potentiel	NN	$^{2S+1}L_J$	N	a	a_l	r_l	P_l
Reid	np	1S_0	30	12	-17.137	2.801	0.026
			40	12	-17.139	2.801	0.026
			40	14	-17.144	2.805	0.029
	pp	3S_1	30	12	5.3890	1.7222	-0.0162
			40	12	5.3899	1.7224	-0.0162
			40	14	5.3897	1.7221	-0.0169
		1S_0	30	12	-7.773	2.716	0.033
			40	12	-7.774	2.716	0.033
			40	14	-7.776	2.722	0.037
Paris	np	1S_0	60	12	-17.69	2.876	0.0272
			80	15	-17.702	2.881	0.0312
			80	20	-17.707	2.882	0.0327
		3S_1	50	12	5.4272	1.7636	-0.0045
			60	15	5.4270	1.7634	-0.00532
			60	20	5.4270	1.7635	-0.00524
	1P_1	30	20	2.985	-5.955	-0.00080	
		40	25	2.987	-5.979	-0.00063	
	pp	3P_0	30	20	-3.056	3.58	-0.022
			40	25	-3.055	3.596	-0.0168
		1S_0	50	12	-7.886	2.79	0.034
			60	15	-7.890	2.802	0.040
			60	20	-7.872	2.807	0.042
		3P_0	30	20	-3.318	3.56	-0.024
	50		25	-3.318	3.583	-0.0178	
Bonn	np	1S_0	40	12	-23.74	2.657	0.036
			40	15	-23.749	2.661	0.0399
			50	20	-23.750	2.662	0.0412
		3S_1	40	12	5.4237	1.7590	-0.0048
			40	15	5.4235	1.7587	-0.0057
			50	20	5.4234	1.7589	-0.0057
	1P_1	30	20	3.067	-5.828	-0.0088	
		40	25	3.0689	-5.851	-0.0070	
	3P_0	30	20	-3.1596	3.104	-0.017	
		40	25	-3.1599	3.115	-0.0117	
		pp	1S_0	40	12	-8.671	2.593
	40			15	-8.6746	2.600	0.050
	3P_0		50	20	-8.6751	2.602	0.0522
			30	20	-3.4177	3.132	-0.019
	40	25	-3.4183	3.144	-0.0129		

TAB. 5.12 – Coefficients du développement en portée effective tels qu’indiqués dans les références [RJ68], [LLR⁺80] et [MHE87] respectivement pour les potentiels de Reid (“soft core”), de Paris et de Bonn.

Potentiel	NN	$^{2S+1}L_J$	a_l	r_l	P_l
Reid	np	1S_0	-17.1	2.80	0.020
		3S_1	5.390	1.720	-0.027
	pp	1S_0	-7.78	2.72	0.028
Paris	nn	1S_0	-17.612	2.881	
	np	3S_1	5.427	1.766	
	pp	1S_0	-7.810	2.797	
Bonn	np	1S_0	-23.751	2.662	
		3S_1	5.423	1.759	
		1P_1	3.069	-5.853	
		3P_0	-3.160	3.116	

le potentiel de Paris peuvent être faits en ce qui concerne la convergence des résultats pour le développement en portée effective. Cependant, de plus petits nombres de points sont requis pour obtenir une précision donnée par rapport au potentiel de Paris. Ceci est probablement dû à la différence de comportement des parties non locales. Dans ce cas-ci le potentiel est ajusté sur la collision np et est en accord avec la longueur de diffusion np expérimentale.

Ces différents résultats nous indiquent que la méthode de la matrice R sur réseau de Lagrange permet de déterminer simplement et avec une bonne précision les déphasages pour les collisions nucléon-nucléon. Les termes non locaux inclus dans les interactions réalistes de Paris et de Bonn peuvent également être traités sur réseau de Lagrange, c’est-à-dire à l’approximation de Gauss, sans réduire de manière significative la précision. Néanmoins ces termes induisent un ralentissement de la convergence des résultats, ce qui nécessite l’augmentation de la taille N du réseau pour obtenir une précision fixée. Une précision de l’ordre de 0.1 degrés, suffisante pour la plupart des applications, est déjà atteinte avec des bases de $N = 20$ fonctions de Lagrange pour les potentiels de Reid et de Bonn, et de $N = 30$ fonctions pour le potentiel de Paris. D’autre part, appliquée à la détermination du développement en portée effective, cette méthode fournit une précision permettant de détecter de petites différences entre les paramètres du développement des potentiels de Paris et de Bonn pour l’onde 3S_1 .

5.6 Conclusions

Dans ce chapitre nous avons introduit la méthode de la matrice R sur réseau de Lagrange afin de déterminer la matrice de collision, et d'en extraire les déphasages caractérisant les fonctions d'onde des états de collision, ainsi que les coefficients du développement en portée effective. Comme dans le cas de la détermination des états liés (chapitre 4), l'utilisation de l'approximation de Gauss simplifie fortement le calcul des éléments de matrice intervenant dans la méthode. Les matrices des parties locales des potentiels sont purement diagonales et facilement évaluées. La matrice correspondant à un potentiel non-local n'est pas diagonale, mais conserve cependant la simplicité des termes locaux, c'est-à-dire qu'elle ne dépend que du potentiel non-local évalué aux points du réseau. Nous avons également considéré une non localité dans les potentiels d'interaction dépendant de p^2 (5.55). Les éléments de matrice correspondant sont évalués à l'approximation de Gauss et présentent une structure similaire à celle de la matrice cinétique. Ces termes ne semblent pas réduire la précision des résultats, bien qu'ils induisent un ralentissement de la convergence.

Nous avons appliqué cette méthode à la diffusion à une voie par un potentiel exponentiel, qui est exactement soluble dans l'onde s . Les résultats obtenus permettent d'étendre au cas des états libres les conclusions du chapitre 4 sur les états liés, à savoir que les calculs sur réseaux de Lagrange se révèlent aussi précis et beaucoup plus simples que des calculs "exacts", c'est-à-dire sans utiliser l'approximation de Gauss. De plus la comparaison des résultats des deux réseaux de Legendre et de Jacobi (0,2) confirme l'observation faite sur le réseau de Laguerre régularisé au chapitre 4, qui est que la base des fonctions de Lagrange ne doit pas être nécessairement orthogonale pour fournir des résultats précis.

La méthode a aussi été utilisée dans le cas de la collision élastique avec un potentiel de Yamaguchi, qui est un potentiel non-local séparable. Cet exemple illustre l'extension de la méthode des réseaux de Lagrange au traitement de potentiels non-locaux. La précision obtenue dans ce cas est comparable à celle obtenue avec des potentiels purement locaux, et valide donc l'utilisation de la méthode des réseaux de Lagrange pour ce type de potentiels.

Nous avons ensuite utilisé la méthode de la matrice R sur réseau de Legendre pour étudier la collision nucléon-nucléon. Les déphasages, ainsi que les coefficients du développement en portée effective, sont obtenus avec une bonne précision. En particulier, pour trois énergies typiques, une précision sur les déphasages de l'ordre de 0.1 degrés est déjà atteinte avec seulement quelques dizaines de points de réseau. Le gain en nombre de points de la méthode sur réseau de Lagrange par rapport à un calcul par différences finies augmente rapidement en fonction de la précision recherchée. En ce qui concerne le développement en portée effective, la précision obtenue permet de détecter de légères différences entre les coefficients du développement correspondant à divers potentiels nucléon-nucléon pour l'onde partielle 3S_1 .

Chapitre 6

Systemes à trois corps - Généralités

6.1 Introduction

Après avoir étudié avec la méthode des réseaux de Lagrange les états liés et libres des systèmes à deux corps, nous nous consacrons aux systèmes à trois corps. Dans ce chapitre, nous considérons quelques systèmes de coordonnées adaptés aux problèmes à trois corps. Dans chaque cas, nous associons aux différentes coordonnées un réseau de Lagrange choisi selon leur domaine de définition. Ceci nous permet de comparer le traitement de ce type de problème par la méthode des réseaux de Lagrange en fonction du système de coordonnées.

Le hamiltonien d'un système à trois corps s'écrit de manière générale

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{p_3^2}{2m_3} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \quad (6.1)$$

où \mathbf{r}_i est la coordonnée de la particule i de masse m_i , et \mathbf{p}_i est son impulsion. Souvent le potentiel V se limite à des interactions à deux corps, ne dépendant que des distances entre les particules. Il s'exprime alors sous la forme

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = V_{13}(r_{13}) + V_{23}(r_{23}) + V_{12}(r_{12}) \quad (6.2)$$

avec les distances interparticules $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$.

Tout système à trois corps possède neuf degrés de liberté qui peuvent être répartis en trois groupes. Le premier correspond à la position du système et est déterminé par la coordonnée du centre de masse. Le deuxième groupe caractérise l'orientation dans l'espace du triangle formé par les trois particules, et peut être représenté à l'aide de trois angles d'Euler. Enfin les trois derniers degrés de liberté définissent la forme du triangle, et correspondent aux coordonnées internes du système. Le mouvement du centre de masse peut être séparé du mouvement relatif des trois particules. L'hamiltonien (6.1) se décompose alors en la somme

$$H = \frac{P_{cm}^2}{2M} + H_{int} \quad (6.3)$$

où M est la masse totale du système. Le premier terme correspond à l'énergie cinétique du centre de masse, et H_{int} représente le hamiltonien décrivant la structure interne du système à trois corps. Nous nous intéressons ici à cet hamiltonien H_{int} , qui est la somme d'une énergie cinétique T_{int} et du potentiel V (6.2). Dans ce chapitre, nous supposons les particules sans spin, et nous ne considérons que les états S , correspondant à un moment cinétique orbital $L = 0$. Dans ce cas la fonction d'onde du système à trois corps est indépendante des angles d'Euler, et ne dépend plus que des trois coordonnées internes. Pour représenter celles-ci, nous considérons les quatre ensembles de coordonnées formés par les coordonnées relatives, de Hylleraas normalisées, de Jacobi et périmétriques.

Afin de comparer le traitement de systèmes à trois corps par la méthode des réseaux de Lagrange avec ces différents systèmes de coordonnées, nous utilisons trois interactions V_{ij} (6.2) identiques. Nous considérons tout d'abord trois potentiels d'oscillateur harmonique, et ensuite trois potentiels gaussiens. Le premier exemple présente l'avantage que l'énergie de l'état fondamental du système à trois corps est connue exactement. Nous pouvons ainsi analyser la convergence de la méthode des réseaux de Lagrange pour chaque système de coordonnées, et également le remplissage de la matrice hamiltonienne dans le calcul variationnel approché. Le choix du potentiel n'a aucun effet sur ce dernier point car nous évaluons les termes potentiels à l'approximation de Gauss, ce qui conduit à une matrice potentielle purement diagonale. Le remplissage de la matrice hamiltonienne provient donc entièrement du terme d'énergie cinétique lors d'un calcul sur réseaux de Lagrange. Nous utilisons enfin trois interactions de type coulombien afin d'analyser le problème des singularités dans les potentiels dans le cas de systèmes à trois corps.

6.2 Systèmes de coordonnées

Dans cette section nous définissons les quatre systèmes de coordonnées (coordonnées relatives, de Hylleraas normalisées, de Jacobi et périmétriques), et nous explicitons les éléments de matrice de l'opérateur cinétique T_{int} , ainsi que la dépendance du potentiel d'interaction exprimé dans ces coordonnées.

6.2.1 Coordonnées relatives

Les coordonnées relatives sont les plus simples à définir pour un système à trois corps. En choisissant la particule 3 comme référence, elles s'écrivent

$$\mathbf{r}_{13} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3 \quad (6.4)$$

$$\mathbf{r}_{23} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3. \quad (6.5)$$

Avec ces coordonnées, le terme d'énergie cinétique du hamiltonien H_{int} devient

$$T_{int} = \frac{p_{13}^2}{2\mu_{13}} + \frac{p_{23}^2}{2\mu_{23}} + \frac{1}{m_3} \mathbf{p}_{13} \cdot \mathbf{p}_{23} \quad (6.6)$$

où μ_{ij} est la masse réduite des particules i et j , et \mathbf{p}_{i3} est l'impulsion associée à la coordonnée relative \mathbf{r}_{i3} . Le terme contenant l'opérateur $\mathbf{p}_{13} \cdot \mathbf{p}_{23}$ est appelé polarisation de masse en physique atomique.

Dans le cas des états S , la fonction d'onde ne dépend que de trois coordonnées internes que nous choisissons égales à

$$\begin{aligned} r_{13} &= |\mathbf{r}_{13}| \\ r_{23} &= |\mathbf{r}_{23}| \\ x &= \cos(\widehat{\theta}_{132}) = \frac{\mathbf{r}_{13} \cdot \mathbf{r}_{23}}{r_{13}r_{23}}. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Elles sont composées des deux distances interparticules r_{13} et r_{23} définies sur $[0, \infty[$, et du cosinus x de l'angle entre les coordonnées relatives \mathbf{r}_{13} et \mathbf{r}_{23} , variant sur l'intervalle $[-1, 1]$. A ces trois coordonnées est associé l'élément de volume

$$dV = r_{13}^2 r_{23}^2 dr_{13} dr_{23} dx. \quad (6.8)$$

Les éléments de matrice de l'énergie cinétique pour les états S pris entre deux fonctions $F(r_{13}, r_{23}, x)$ et $G(r_{13}, r_{23}, x)$ peuvent s'écrire avec les trois variables (6.7) sous la forme

$$\begin{aligned} \langle F | T_{int} | G \rangle &= \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{-1}^1 dr_{13} dr_{23} dx r_{13} r_{23} F(r_{13}, r_{23}, x) \left\{ -\frac{1}{2\mu_{13}} \partial_{r_{13}}^2 \right. \\ &\quad -\frac{1}{2\mu_{23}} \partial_{r_{23}}^2 - \left(\frac{1}{2\mu_{13}r_{13}^2} + \frac{1}{2\mu_{23}r_{23}^2} \right) \left((1-x^2)\partial_x^2 - 2x\partial_x \right) \\ &\quad -\frac{1}{m_3} \left[x\partial_{r_{13}}\partial_{r_{23}} + \left((1-x^2)\partial_x - x \right) \left(\frac{1}{r_{13}}\partial_{r_{23}} + \frac{1}{r_{23}}\partial_{r_{13}} \right) \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{r_{13}r_{23}} \left(x + (3x^2 - 1)\partial_x - x(1-x^2)\partial_x^2 \right) \right] \right\} r_{13}r_{23}G(r_{13}, r_{23}, x) \end{aligned} \quad (6.9)$$

en choisissant $\hbar = 1$. Nous avons effectué la commutation du facteur $r_{13}r_{23}$, provenant de l'élément de volume (6.8), avec les opérateurs différentiels afin de faire apparaître ce facteur de manière symétrique à gauche et à droite des différents opérateurs. Cette notation est plus intéressante pour le traitement sur réseau de Lagrange (voir plus loin). Le potentiel (6.2) devient quant à lui

$$V = V_{13}(r_{13}) + V_{23}(r_{23}) + V_{12} \left(\sqrt{r_{13}^2 + r_{23}^2 - 2r_{13}r_{23}x} \right) \quad (6.10)$$

exprimé dans les coordonnées relatives.

6.2.2 Coordonnées de Hylleraas normalisées

Les coordonnées de Hylleraas ont été introduites afin d'étudier l'atome d'hélium [BS57]. Elles prennent la forme de combinaisons linéaires des distances interparticules

$$\begin{aligned} s &= r_{13} + r_{23} \\ t &= r_{13} - r_{23} \\ u &= r_{12} \end{aligned} \quad (6.11)$$

La variable s est définie sur l'intervalle $[0, \infty[$, et les conditions que doivent vérifier les trois distances interparticules, car elles forment les côtés d'un triangle, nous fournissent $0 \leq u \leq s$ et $-u \leq t \leq u$. Ces trois variables présentent donc des domaines de définition qui dépendent des autres coordonnées. Ceci ne convient pas à un traitement sur réseaux de Lagrange, pour lesquels les intervalles de définition sont fixés. Nous introduisons donc les coordonnées de Hylleraas normalisées en posant

$$\begin{aligned} x &= t/u \\ y &= u/s \\ z &= s. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Ces nouvelles variables x, y et z sont ainsi définies respectivement sur les intervalles $[-1, 1]$, $[0, 1]$ et $[0, \infty[$. L'élément de volume associé est donné par

$$dV = y^2 z^5 (1 - x^2 y^2) dx dy dz. \quad (6.13)$$

Chuluunbaatar, Puzynin et Vinitzky [CPV01] ont récemment utilisé ces coordonnées pour déterminer les énergies des états fondamentaux de plusieurs systèmes atomiques à deux électrons. Avec ces coordonnées de Hylleraas normalisées, l'élément de matrice de l'énergie cinétique entre deux fonctions $F(x, y, z)$ et $G(x, y, z)$ peut s'écrire

$$\begin{aligned} \langle F | T_{int} | G \rangle &= \int_{-1}^1 \int_0^1 \int_0^\infty dx dy dz \\ &\left\{ z^3 (1 - x^2) \left[\frac{(1 - xy)^2}{2m_1} + \frac{(1 + xy)^2}{2m_2} + \frac{2y^2}{m_3} \right] \partial_x F \partial_x G \right. \\ &+ y^2 z^3 (1 - y^2) \left[\frac{(1 - xy)^2}{2m_1} + \frac{(1 + xy)^2}{2m_2} + \frac{2y^2}{m_3} \right] \partial_y F \partial_y G \\ &+ y^2 z^5 \left[\left(\frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2} \right) (1 - x^2 y^2) + \frac{2(1 - y^2)}{m_3} \right] \partial_z F \partial_z G \\ &+ y z^4 (1 - x^2) \left[\frac{1 - xy}{2m_1} - \frac{1 + xy}{2m_2} \right] (\partial_x F \partial_z G + \partial_z F \partial_x G) \\ &+ y^2 z^4 (1 - y^2) \left[\frac{x(1 - xy)}{2m_1} - \frac{x(1 + xy)}{2m_2} - \frac{2y}{m_3} \right] \\ &\left. \times (\partial_y F \partial_z G + \partial_z F \partial_y G) \right\}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Cette expression a l'avantage d'être explicitement symétrique vis-à-vis de l'échange des fonctions F et G , ce qui traduit l'hermiticité de cet élément de matrice. Exprimé dans ce système de coordonnées, le potentiel (6.2) s'écrit

$$V = V_{13} \left(\frac{z(1 + xy)}{2} \right) + V_{23} \left(\frac{z(1 - xy)}{2} \right) + V_{12}(yz). \quad (6.15)$$

6.2.3 Coordonnées de Jacobi

Les coordonnées de Jacobi, qui sont une variante des coordonnées relatives, sont fort utilisées pour traiter des problèmes à plus de deux corps. Chacune de

ces coordonnées est la coordonnée relative entre une particule i et le centre de masse de toutes les précédentes. Pour un système à trois corps, en choisissant la particule 3 comme référence, elles s'écrivent explicitement

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{R} &= \mathbf{r}_3 - \frac{1}{m_1 + m_2} (m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (6.16)$$

et présentent une dépendance en les masses m_1 et m_2 . Dans ce cas-ci, l'opérateur d'énergie cinétique interne devient

$$T_{int} = \frac{p^2}{2\mu_{12}} + \frac{P^2}{2\mu_{123}} \quad (6.17)$$

avec les impulsions \mathbf{p} et \mathbf{P} associées aux coordonnées de Jacobi \mathbf{r} et \mathbf{R} , et les masses réduites $\mu_{12} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ et $\mu_{123} = \frac{m_3(m_1 + m_2)}{m_1 + m_2 + m_3}$. L'expression (6.17) est évidemment beaucoup plus simple que (6.6) puisqu'il n'y a plus de terme de polarisation de masse. Comme dans le cas des coordonnées relatives, nous choisissons pour représenter les trois degrés de liberté des états S , les deux distances r et R et le cosinus x de l'angle entre les vecteurs \mathbf{r} et \mathbf{R} . L'élément de volume est similaire à (6.8), c'est-à-dire

$$dV = r^2 R^2 dr dR dx. \quad (6.18)$$

L'élément de matrice de l'énergie cinétique dans les coordonnées de Jacobi peut se déduire de l'expression (6.9) dans les coordonnées relatives, et est donné par

$$\begin{aligned} \langle F | T_{int} | G \rangle &= \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{-1}^1 dr dR dx r R F(r, R, x) \left\{ -\frac{1}{\mu_{12}} \partial_r^2 - \frac{1}{\mu_{123}} \partial_R^2 \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{1}{2\mu_{12}r^2} + \frac{1}{2\mu_{123}R^2} \right) \left((1-x^2) \partial_x^2 - 2x \partial_x \right) \right\} r R G(r, R, x). \end{aligned} \quad (6.19)$$

Le potentiel d'interaction devient avec ces coordonnées

$$\begin{aligned} V &= V_{13} \left(\sqrt{R^2 + \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} r^2 + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} r R x} \right) \\ &\quad + V_{23} \left(\sqrt{R^2 + \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} r^2 - \frac{2m_1}{m_1 + m_2} r R x} \right) + V_{12}(r). \end{aligned} \quad (6.20)$$

La simplification du terme d'énergie cinétique se fait donc au détriment de l'expression du potentiel.

6.2.4 Coordonnées périmétriques

Les coordonnées périmétriques [Pek58, Zhe90] constituent une variante des coordonnées de Hylleraas en ce sens qu'elles correspondent également à

des combinaisons linéaires des distances interparticules, mais contrairement à celles-ci, elles traitent les trois particules de façon tout à fait symétrique. Ces coordonnées sont données par

$$\begin{aligned} x &= r_{12} - r_{23} + r_{13} \\ y &= r_{12} + r_{23} - r_{13} \\ z &= -r_{12} + r_{23} + r_{13} \end{aligned} \quad (6.21)$$

en fonction des distances r_{ij} entre les particules i et j . Elles sont toutes trois définies sur l'intervalle $[0, \infty[$. L'élément de volume associé à ces coordonnées s'écrit

$$dV = (x + y)(x + z)(y + z)dxdydz. \quad (6.22)$$

L'élément de matrice de l'énergie cinétique entre deux fonctions $F(x, y, z)$ et $G(x, y, z)$ est donné par l'expression symétrique

$$\begin{aligned} \langle F | T_{int} | G \rangle &= 2 \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \int_0^\infty dz \\ &\left\{ \left[\frac{x(y+z)(x+y+z)}{m_1} + \frac{xz(z+x)}{m_2} + \frac{xy(x+y)}{m_3} \right] \partial_x F \partial_x G \right. \\ &+ \left[\frac{yz(y+z)}{m_1} + \frac{y(z+x)(x+y+z)}{m_2} + \frac{xy(x+y)}{m_3} \right] \partial_x F \partial_y G \\ &+ \left[\frac{yz(y+z)}{m_1} + \frac{xz(z+x)}{m_2} + \frac{z(x+y)(x+y+z)}{m_3} \right] \partial_z F \partial_z G \\ &- \frac{yz(y+z)}{m_1} (\partial_y F \partial_z G + \partial_z F \partial_y G) \\ &- \frac{xz(z+x)}{m_2} (\partial_z F \partial_x G + \partial_x F \partial_z G) \\ &\left. - \frac{xy(x+y)}{m_3} (\partial_x F \partial_y G + \partial_y F \partial_x G) \right\}, \end{aligned} \quad (6.23)$$

et le potentiel s'exprime dans les coordonnées périmétriques selon

$$V = V_{13} \left(\frac{x+z}{2} \right) + V_{23} \left(\frac{y+z}{2} \right) + V_{12} \left(\frac{x+y}{2} \right). \quad (6.24)$$

6.3 Choix des réseaux de Lagrange

A chaque système de coordonnées ainsi défini, nous associons des réseaux de Lagrange choisis en fonction des domaines de définition des différentes variables. Les quatre ensembles de coordonnées considérés ici ne font intervenir que trois domaines différents. Il s'agit de l'intervalle semi-infini $[0, \infty[$, et des deux intervalles finis $[-1, 1]$ et $[0, 1]$. Aux coordonnées variant sur $[0, \infty[$, nous couplons un réseau de Laguerre (2.106) de N points, et les fonctions de Lagrange-Laguerre f_i^N (2.109). La répartition des points de ce réseau est contrôlée à l'aide d'un facteur d'échelle h . Aux coordonnées définies sur les intervalles $[-1, 1]$ et $[0, 1]$, nous associons respectivement un réseau de Legendre

(2.94) et un réseau de Legendre translaté (2.103). Les fonctions de Lagrange correspondantes sont notées g_i^N et q_i^N . Les réseaux de Lagrange étant dans ces deux cas définis sur l'intervalle adéquat, aucun facteur d'échelle n'est nécessaire.

Les fonctions de base de Lagrange à trois dimensions dans chacun des quatre systèmes de coordonnées peuvent s'écrire

$$F_{ijk}(c_1, c_2, c_3) = N_{ijk}^{-1/2} \mathcal{F}_i^{N_1}(c_1/h_1) \mathcal{F}_j^{N_2}(c_2/h_2) \mathcal{F}_k^{N_3}(c_3/h_3) \quad (6.25)$$

où \mathcal{F} est une fonction de Lagrange à une dimension, et c_1 , c_2 et c_3 représentent les trois coordonnées, décrites par des réseaux de Lagrange respectivement de N_1 , N_2 et N_3 points, avec les facteurs d'échelle correspondant h_1 , h_2 et h_3 . Le facteur de normalisation N_{ijk} est introduit afin de rendre les fonctions de base F_{ijk} orthonormées à l'approximation de Gauss vis-à-vis de l'élément de volume $dV = J(c_1, c_2, c_3)dc_1dc_2dc_3$ adéquat

$$\int \int \int dc_1dc_2dc_3 J(c_1, c_2, c_3) F_{ijk}(c_1, c_2, c_3) F_{i'j'k'}(c_1, c_2, c_3) \approx \delta_{ii'}\delta_{jj'}\delta_{kk'}. \quad (6.26)$$

Nous déduisons de cette expression

$$N_{ijk} = h_1h_2h_3J(c_{1i}, c_{2j}, c_{3k}), \quad (6.27)$$

c'est-à-dire que le facteur de normalisation est égal au jacobien de l'élément de volume calculé aux points du réseau à trois dimensions.

Ces fonctions de Lagrange à trois dimensions F_{ijk} servent de base à un calcul variationnel permettant de déterminer l'énergie de l'état fondamental du système à trois corps considéré. La fonction d'essai de ce calcul s'écrit

$$\Psi = \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} \sum_{k=1}^{N_3} C_{ijk} F_{ijk} \quad (6.28)$$

où les coefficients C_{ijk} jouent le rôle de paramètres variationnels. Le nombre total de fonctions de base N_T est égal à $N_1N_2N_3$. L'équation de Schrödinger se ramène alors au système matriciel

$$\sum_{K=1}^{N_T} H_{IK} C_K = E C_I \delta_{IK} \quad (6.29)$$

où I et K représentent les trois indices (ijk) et les H_{IK} sont les éléments de matrice du hamiltonien entre les fonctions de base de Lagrange F_{ijk} . Dans le membre de droite de (6.29) nous utilisons l'orthonormalité à l'approximation de Gauss de ces fonctions, ce qui conduit au terme δ_{IK} .

Nous allons maintenant exprimer les éléments de matrice des termes d'énergie cinétique et potentielle sur réseaux de Lagrange, et examiner le remplissage de la matrice hamiltonienne correspondante. Dans tous les cas les termes potentiels sont évalués très simplement à l'approximation de Gauss, et ne font intervenir que les potentiels calculés aux points du réseau à trois dimensions. De plus la matrice potentielle ainsi déterminée est purement diagonale. Le remplissage de la matrice hamiltonienne est donc entièrement dû au terme d'énergie cinétique.

6.3.1 Coordonnées relatives

Dans le cas des coordonnées relatives, les trois variables indépendantes décrivant la structure interne du système à trois corps sont les deux distances r_{13} et r_{23} , et la coordonnée d'origine angulaire x . A la coordonnée r_{13} est associé un réseau de Laguerre de N_1 points r_{1i} et le facteur d'échelle h_1 . Le réseau de Laguerre pour la coordonnée r_{23} contient N_2 points r_{2j} , et le facteur d'échelle est noté h_2 . La variable x est quant à elle décrite par un réseau de Legendre de N_x points x_k .

Les fonctions de base de Lagrange du calcul variationnel s'écrivent

$$F_{ijk}(r_{13}, r_{23}, x) = N_{ijk}^{-1/2} \tilde{f}_i^{N_1}(r_{13}/h_1) \tilde{f}_j^{N_2}(r_{23}/h_2) g_k^{N_x}(x). \quad (6.30)$$

La notation "tilde" indique que les fonctions de Lagrange-Laguerre sont régularisées (2.122). Nous choisissons en effet les fonctions régularisées car nous introduisons le facteur $r_{13}r_{23}$, issu de l'élément de volume (6.8) et apparaissant dans l'expression (6.9), directement dans les fonctions de base de Lagrange. Le facteur de normalisation N_{ijk} vaut alors simplement $N_{ijk} = h_1 h_2$.

Les éléments de matrice de l'énergie cinétique (6.9) entre fonctions de base de Lagrange peuvent alors s'écrire

$$\begin{aligned} \langle F_{ijk} | T_{int} | F_{i'j'k'} \rangle \approx & \frac{1}{2\mu_{13}h_1^2} T_{ii'}^{N_1} \delta_{jj'} \delta_{kk'} + \frac{1}{2\mu_{23}h_2^2} T_{jj'}^{N_2} \delta_{ii'} \delta_{kk'} \\ & + \delta_{ii'} \delta_{jj'} \left(\frac{1}{2\mu_{13}h_1^2 r_{1i}^2} + \frac{1}{2\mu_{23}h_2^2 r_{2j}^2} \right) \\ & \times (\lambda_k^x)^{1/2} \left(2x_k (g_{k'}^{N_x})'(x_k) - (1-x_k^2) (g_{k'}^{N_x})''(x_k) \right) \\ & - \frac{1}{m_3 h_1 h_2} \left[(\lambda_k^x)^{1/2} (1-x_k^2) (g_{k'}^{N_x})'(x_k) (1-\delta_{kk'}) \right. \\ & \times \left(\frac{p_{jj'}^{N_2}}{r_{1i}} \delta_{ii'} + \frac{p_{ii'}^{N_1}}{r_{2j}} \delta_{jj'} \right) + x_k \delta_{kk'} p_{ii'}^{N_1} p_{jj'}^{N_2} \\ & + \frac{\delta_{ii'} \delta_{jj'}}{r_{1i} r_{2j}} \left(x_k \delta_{kk'} + (\lambda_k^x)^{1/2} (3x_k^2 - 1) (g_{k'}^{N_x})'(x_k) \right. \\ & \left. \left. - (\lambda_k^x)^{1/2} x_k (1-x_k^2) (g_{k'}^{N_x})''(x_k) \right) \right] \quad (6.31) \end{aligned}$$

où λ_k^x est le poids de Gauss-Legendre. Les éléments $T_{ii'}^N$ correspondent aux éléments de matrice de l'énergie cinétique à un corps, et sont donnés par les formules (2.127) et (2.128) dans le cas du réseau de Laguerre. Les termes $p_{ii'}^N$ représentent les éléments de matrice de l'opérateur à un corps $\frac{d}{dr}$ entre fonctions de Lagrange-Laguerre régularisées. Leur expression, ainsi que celles des dérivées première et seconde de la fonction de Lagrange-Legendre $g_k^N(x)$ évaluées aux points du réseau de Legendre, sont explicitées à l'annexe D.

L'analyse de l'expression (6.31) indique clairement que le terme de polarisation de masse est la source principale du remplissage de la matrice hamiltonienne. Le nombre d'éléments non nuls de cette matrice est donné par la formule suivante

$$\mathcal{N} = N_1 N_2 N_x ((N_1 - 1)(N_2 - 1) + N_x (N_1 + N_2 - 1)). \quad (6.32)$$

Les éléments de matrice du potentiel (6.10) entre fonctions de base de Lagrange s'écrivent simplement

$$\begin{aligned} \langle F_{ijk}|V|F_{i'j'k'} \rangle \approx & [V_{13}(h_1 r_{1i}) + V_{23}(h_2 r_{2j}) \\ & + V_{12} \left(\sqrt{h_1^2 r_{1i}^2 + h_2^2 r_{2j}^2 - 2h_1 h_2 r_{1i} r_{2j} x_k} \right)] \delta_{ii'} \delta_{jj'} \delta_{kk'} \end{aligned} \quad (6.33)$$

à l'approximation de Gauss.

6.3.2 Coordonnées de Hylleraas normalisées

Les trois coordonnées de Hylleraas normalisées étant définies sur des intervalles différents, trois réseaux de Lagrange différents sont requis. A la coordonnée z nous associons un réseau de Laguerre de N_z points z_k et un facteur d'échelle h_z . Le réseau de Legendre décrivant la variable x contient N_x points x_i répartis sur $[-1, 1]$, et le réseau de Legendre translaté, associé à la coordonnée y , N_y points y_j sur $[0, 1]$.

Les fonctions de Lagrange à trois dimensions prennent alors la forme suivante

$$F_{ijk}(x, y, z) = N_{ijk}^{-1/2} g_i^{N_x}(x) q_j^{N_y}(y) f_k^{N_z}(z/h_z). \quad (6.34)$$

Le facteur de normalisation N_{ijk} est égal à

$$N_{ijk} = y_j^2 h_z^6 z_k^5 (1 - x_i^2 y_j^2). \quad (6.35)$$

Avec ces fonctions de base, les éléments de matrice de l'énergie cinétique deviennent

$$\begin{aligned} \langle F_{ijk}|T_{int}|F_{i'j'k'} \rangle \approx & (N_{ijk} N_{i'j'k'})^{-1/2} h_z^4 \left\{ z_k^3 \delta_{jj'} \delta_{kk'} \sum_{m=1}^{N_x} (1 - x_m^2) \right. \\ & \times \left[\frac{(1 - x_m y_j)^2}{2m_1} + \frac{(1 + x_m y_j)^2}{2m_2} + \frac{2y_j^2}{m_3} \right] \\ & \times (g_i^{N_x})'(x_m) (g_{i'}^{N_x})'(x_m) \\ & + z_k^3 \delta_{ii'} \delta_{kk'} \sum_{q=1}^{N_y} y_q^2 (1 - y_q^2) \\ & \times \left[\frac{(1 - x_i y_q)^2}{2m_1} + \frac{(1 + x_i y_q)^2}{2m_2} + \frac{2y_q^2}{m_3} \right] (q_j^{N_y})'(y_q) (q_{j'}^{N_y})'(y_q) \\ & + y_j^2 \delta_{ii'} \delta_{jj'} \left[\left(\frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_2} \right) (1 - x_i^2 y_j^2) + \frac{2(1 - y_j^2)}{m_3} \right] \\ & \times \sum_{r=1}^{N_z} z_r^5 (f_k^{N_z})'(z_r) (f_{k'}^{N_z})'(z_r) \\ & + y_j \delta_{jj'} \left[z_k^4 (1 - x_{i'}^2) \left[\frac{1 - x_{i'} y_j}{2m_1} - \frac{1 + x_{i'} y_j}{2m_2} \right] \right. \\ & \times (g_{i'}^{N_x})'(x_{i'}) (f_{k'}^{N_z})'(z_k) \\ & \left. + z_{k'}^4 (1 - x_i^2) \left[\frac{1 - x_i y_j}{2m_1} - \frac{1 + x_i y_j}{2m_2} \right] (g_{i'}^{N_x})'(x_i) (f_k^{N_z})'(z_{k'}) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\delta_{ii'} \left[y_j^2 z_{k'}^4 (1 - y_j^2) \left[\frac{x_i(1 - x_i y_j)}{2m_1} - \frac{x_i(1 + x_i y_j)}{2m_2} - \frac{2y_j}{m_3} \right] \right. \\
& \times (q_{j'}^{N_y})'(y_j) (f_k^{N_z})'(z_{k'}) \\
& + y_j^2 z_k^4 (1 - y_j^2) \left[\frac{x_i(1 - x_i y_{j'})}{2m_1} - \frac{x_i(1 + x_i y_{j'})}{2m_2} - \frac{2y_{j'}}{m_3} \right] \\
& \left. \times (q_j^{N_y})'(y_{j'}) (f_{k'}^{N_z})'(z_k) \right] \} \quad (6.36)
\end{aligned}$$

lorsqu'ils sont évalués à l'aide de la règle de quadrature de Gauss. Les dérivées des différentes fonctions de Lagrange à une dimension évaluées aux points du réseau correspondant sont explicitées à l'annexe D. Le choix de la forme symétrique de l'expression (6.14) de ces éléments de matrice nous garantit l'hermiticité de la matrice hamiltonienne calculée à l'approximation de Gauss.

Nous pouvons maintenant examiner le remplissage de la matrice hamiltonienne. Nous obtenons la formule suivante

$$\mathcal{N} = N_x N_y N_z^2 (N_x + N_y - 1) \quad (6.37)$$

donnant le nombre d'éléments non nuls de la matrice. La matrice potentielle présente toujours des éléments non nuls uniquement sur la diagonale. Ceux-ci sont donnés par

$$\begin{aligned}
\langle F_{ijk} | V | F_{i'j'k'} \rangle \approx & \left[V_{13} \left(\frac{h_z z_k (1 + x_i y_j)}{2} \right) + V_{23} \left(\frac{h_z z_k (1 - x_i y_j)}{2} \right) \right. \\
& \left. + V_{12} (h_z y_j z_k) \right] \delta_{ii'} \delta_{jj'} \delta_{kk'}. \quad (6.38)
\end{aligned}$$

6.3.3 Coordonnées de Jacobi

Similairement au cas des coordonnées relatives nous associons deux réseaux de Laguerre aux coordonnées r et R , et un réseau de Legendre pour la coordonnée angulaire x . Les deux réseaux de Laguerre présentent respectivement N_r points r_i et N_R points R_j dont la répartition sur $[0, \infty[$ est contrôlée à l'aide des facteurs d'échelle h_r et h_R . Le réseau de Legendre contient quant à lui N_x points x_k .

Les fonctions de base de Lagrange à trois dimensions s'écrivent

$$F_{ijk}(r, R, x) = N_{ijk}^{-1/2} \tilde{f}_i^{N_r}(r/h_r) \tilde{f}_j^{N_R}(R/h_R) g_k^{N_x}(x). \quad (6.39)$$

Comme pour les coordonnées relatives nous utilisons les fonctions de Lagrange-Laguerre régularisées avec le facteur de régularisation qui provient de l'élément de volume (6.18). Le facteur de normalisation N_{ijk} est semblable à celui des coordonnées relatives et vaut $N_{ijk} = h_r h_R$.

Les éléments de matrice de l'énergie cinétique dans cette base prennent une forme équivalente à (6.31) sans le terme de polarisation de masse

$$\langle F_{ijk} | T_{int} | F_{i'j'k'} \rangle \approx \frac{1}{2\mu_{12} h_r^2} T_{ii'}^{N_r} \delta_{jj'} \delta_{kk'} + \frac{1}{2\mu_{123} h_R^2} T_{jj'}^{N_R} \delta_{ii'} \delta_{kk'}$$

$$\begin{aligned}
& +\delta_{ii'}\delta_{jj'}\left(\frac{1}{2\mu_{12}h_r^2r_i^2}+\frac{1}{2\mu_{123}h_R^2R_j^2}\right) \\
& \times(\lambda_k^x)^{1/2}\left(2x_k(g_{k'}^{N_x})'(x_k)-(1-x_k^2)(g_{k'}^{N_x})''(x_k)\right)
\end{aligned} \tag{6.40}$$

avec les poids de Gauss-Legendre λ_k^x .

Le nombre d'éléments non nuls \mathcal{N} de la matrice hamiltonienne est donné par

$$\mathcal{N} = N_r N_R N_x (N_r + N_R + N_x - 2). \tag{6.41}$$

A nombres de points de réseaux égaux, la matrice hamiltonienne est donc plus creuse dans le cas des coordonnées de Jacobi que lorsque nous utilisons les coordonnées relatives, la différence provenant du terme de polarisation de masse.

Évaluée à l'approximation de Gauss, la matrice potentielle est purement diagonale et ses éléments non nuls valent

$$\begin{aligned}
\langle F_{ijk}|V|F_{i'j'k'}\rangle \approx & \left[V_{13} \left(\sqrt{h_R^2 R_j^2 + \frac{m_2^2}{(m_1+m_2)^2} h_r^2 r_i^2 + \frac{2m_2}{m_1+m_2} h_r r_i h_R R_j x_k} \right) \right. \\
& + V_{23} \left(\sqrt{h_R^2 R_j^2 + \frac{m_1^2}{(m_1+m_2)^2} h_r^2 r_i^2 - \frac{2m_1}{m_1+m_2} h_r r_i h_R R_j x_k} \right) \\
& \left. + V_{12}(h_r r_i) \right] \delta_{ii'} \delta_{jj'} \delta_{kk'}.
\end{aligned} \tag{6.42}$$

6.3.4 Coordonnées périmétriques

Les trois réseaux de Laguerre associés aux variables périmétriques x , y et z sont constitués respectivement de N_x , N_y et N_z points, notés x_i , y_j et z_k , dont la répartition sur $[0, \infty[$ est ajustée à l'aide des facteurs d'échelle h_x , h_y et h_z . Les poids de Gauss-Laguerre correspondants sont notés λ_i^x , λ_j^y et λ_k^z .

Les fonctions de Lagrange-Laguerre à trois dimensions s'écrivent alors en coordonnées périmétriques

$$F_{ijk}(x, y, z) = N_{ijk}^{-1/2} f_i^{N_x}(x/h_x) f_j^{N_y}(y/h_y) f_k^{N_z}(z/h_z). \tag{6.43}$$

Le facteur de normalisation est égal à

$$N_{ijk} = h_x^6 \nu \kappa (x_i + \nu y_j)(x_i + \kappa z_k)(\nu y_j + \kappa z_k) \tag{6.44}$$

en utilisant les notations $\nu = h_y/h_x$ et $\kappa = h_z/h_x$ pour les facteurs d'échelle.

Les éléments de matrice de l'énergie cinétique dans cette base sont déterminés en utilisant la règle de quadrature de Gauss

$$\begin{aligned}
\langle F_{ijk}|T_{int}|F_{i'j'k'}\rangle \approx & 2(N_{ijk}N_{i'j'k'})^{-1/2} h_x^4 \nu \kappa \left\{ \delta_{jj'} \delta_{kk'} \sum_{m=1}^{N_x} \lambda_m^x \left[\frac{x_m \kappa z_k (\kappa z_k + x_m)}{m_2} \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{x_m (\nu y_j + \kappa z_k)(x_m + \nu y_j + \kappa z_k)}{m_1} + \frac{x_m \nu y_j (x_m + \nu y_j)}{m_3} \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times (f_i^{N_x})'(x_m)(f_{i'}^{N_x})'(x_m) \\
& + \delta_{ii'}\delta_{kk'} \sum_{q=1}^{N_y} \lambda_q^y \left[\frac{\nu y_q \kappa z_k (\nu y_q + \kappa z_k)}{m_1} + \frac{x_i \nu y_q (x_i + \nu y_q)}{m_3} \right. \\
& \left. + \frac{\nu y_q (\kappa z_k + x_i)(x_i + \nu y_q + \kappa z_k)}{m_2} \right] (f_j^{N_y})'(y_q)(f_{j'}^{N_y})'(y_q) \\
& + \delta_{ii'}\delta_{jj'} \sum_{r=1}^{N_z} \lambda_r^z \left[\frac{\nu y_j \kappa z_r (\nu y_j + \kappa z_r)}{m_1} + \frac{x_i \kappa z_r (\kappa z_r + x_i)}{m_2} \right. \\
& \left. + \frac{\kappa z_r (x_i + \nu y_j)(x_i + \nu y_q + \kappa z_r)}{m_3} \right] (f_k^{N_z})'(z_r)(f_{k'}^{N_z})'(z_r) \\
& - \frac{\delta_{ii'}}{m_1} \left[(\lambda_j^y \lambda_{k'}^z)^{1/2} \nu y_j \kappa z_{k'} (\nu y_j + \kappa z_{k'}) (f_k^{N_z})'(z_{k'}) (f_{j'}^{N_y})'(y_j) \right. \\
& \left. + (\lambda_j^y \lambda_k^z)^{1/2} \nu y_{j'} \kappa z_k (\nu y_{j'} + \kappa z_k) (f_{k'}^{N_z})'(z_k) (f_j^{N_y})'(y_{j'}) \right] \\
& - \frac{\delta_{jj'}}{m_2} \left[(\lambda_i^x \lambda_{k'}^z)^{1/2} x_i \kappa z_{k'} (x_i + \kappa z_{k'}) (f_k^{N_z})'(z_{k'}) (f_{i'}^{N_x})'(x_i) \right. \\
& \left. + (\lambda_i^x \lambda_k^z)^{1/2} x_{i'} \kappa z_k (x_{i'} + \kappa z_k) (f_{k'}^{N_z})'(z_k) (f_i^{N_x})'(x_{i'}) \right] \\
& - \frac{\delta_{kk'}}{m_3} \left[(\lambda_i^x \lambda_{j'}^y)^{1/2} x_i \nu y_{j'} (x_i + \nu y_{j'}) (f_j^{N_y})'(y_{j'}) (f_{i'}^{N_x})'(x_i) \right. \\
& \left. + (\lambda_{i'}^x \lambda_j^y)^{1/2} x_{i'} \nu y_j (x_{i'} + \nu y_j) (f_{j'}^{N_y})'(y_j) (f_i^{N_x})'(x_{i'}) \right] \Big\}. \tag{6.45}
\end{aligned}$$

A partir de ces expressions nous pouvons déterminer le remplissage de la matrice hamiltonienne. Le nombre d'éléments non nuls de celle-ci vaut

$$\mathcal{N} = N_x N_y N_z ((N_x + N_y)(N_z - 1) + N_x N_y - N_z + 1). \tag{6.46}$$

Les éléments de matrice du potentiel s'écrivent quant à eux

$$\begin{aligned}
\langle F_{ijk} | V | F_{i'j'k'} \rangle & \approx \left[V_{13} \left(h_x \frac{x_i + \kappa z_k}{2} \right) + V_{23} \left(h_x \frac{\nu y_j + \kappa z_k}{2} \right) \right. \\
& \left. + V_{12} \left(h_x \frac{x_i + \nu y_j}{2} \right) \right] \delta_{ii'} \delta_{jj'} \delta_{kk'}. \tag{6.47}
\end{aligned}$$

6.4 Applications

6.4.1 Potentiels d'oscillateur harmonique

Afin d'analyser la convergence des calculs sur réseaux de Lagrange en fonction du système de coordonnées, nous considérons tout d'abord des potentiels d'interactions de type oscillateur harmonique. Les trois potentiels V_{ij} entre les particules i et j sont alors définis par

$$V_{ij}(r_{ij}) = \frac{r_{ij}^2}{6}. \tag{6.48}$$

Pour simplifier le problème nous supposons les trois particules de même masse, et nous la choisissons unitaire, c'est-à-dire $m_i = 1$ avec $i = 1, 2, 3$. Dans ces conditions, l'énergie de l'état fondamental du système à trois corps peut être déterminée exactement, et est égale à 3. Dans le cas de la méthode des réseaux de Lagrange, nous devons résoudre le système matriciel (6.29). En particulier la détermination de l'énergie de l'état fondamental requiert la recherche de la plus petite valeur propre de la matrice hamiltonienne dans la base de Lagrange. Pour ce faire nous utilisons l'algorithme de Davidson tel que développé par Stathopoulos et Fisher [SF94].

Le tableau 6.1 reprend les erreurs obtenues sur l'énergie de l'état fonda-

TAB. 6.1 – Erreurs ϵ sur l'énergie de l'état fondamental d'un système de trois particules sans spin de masse $m = 1$, avec des potentiels d'oscillateur harmonique, obtenues par un calcul sur réseaux de Lagrange avec différents systèmes de coordonnées. La valeur exacte de cette énergie est $E = 3$.

Coordonnées	N_1	N_2	N_3	h_1	h_2	h_3	N_T	ϵ	\mathcal{N}
Relatives	4	4	4	0.2	0.2		64	-0.02	2 368
	8	8	8	0.3	0.3		512	$6 \cdot 10^{-5}$	86 528
	12	12	8	0.2	0.2		1152	$5 \cdot 10^{-7}$	351 360
	14	14	10	0.2	0.2		1960	$3 \cdot 10^{-8}$	860 440
Hylleraas	4	4	4			0.9	64	$-5 \cdot 10^{-3}$	1 792
	8	8	8			0.3	512	$-4 \cdot 10^{-3}$	61 440
	8	8	12			0.3	768	$-2 \cdot 10^{-5}$	138 240
	10	10	16			0.3	1600	-10^{-7}	486 400
Jacobi	4	4	1	0.3	0.3		16	0.02	112
	8	8	1	0.2	0.2		64	-10^{-5}	960
	12	12	1	0.2	0.2		144	$4 \cdot 10^{-9}$	3 312
	16	16	1	0.2	0.2		256	$7 \cdot 10^{-10}$	7 936
Périmétriques	4	4	4	0.4	0.4	0.4	64	$-6 \cdot 10^{-3}$	2 368
	8	8	8	0.4	0.4	0.4	512	$-6 \cdot 10^{-6}$	86 528
	12	12	12	0.4	0.4	0.4	1728	10^{-8}	686 016

mental du système à trois corps pour les quatre systèmes de coordonnées. Les nombres de points de réseau N_1 , N_2 et N_3 correspondent aux nombres N_1 , N_2 et N_x pour les coordonnées relatives, N_x , N_y et N_z pour les coordonnées de Hylleraas normalisées et périmétriques, N_r , N_R et N_x pour les coordonnées de Jacobi. Les facteurs d'échelle intervenant avec les différents systèmes de coordonnées et associés aux réseaux de N_1 , N_2 et N_3 points sont notés h_1 , h_2 et h_3 . Ils sont déterminés de manière à minimiser l'erreur sur l'énergie. Le nombre \mathcal{N} d'éléments non nuls de la matrice hamiltonienne est indiqué dans la dernière colonne.

La convergence en fonction de N_T avec les coordonnées de Hylleraas normalisées est plus lente que dans les cas des trois autres systèmes de coordonnées. A taille de base fixée, la précision sur l'énergie est la moins bonne avec ces coordonnées. Elle dépend principalement du nombre de points $N_3 = N_z$ cor-

respondant au réseau de Laguerre. Ceci est général et est encore valable pour les autres systèmes de coordonnées : la précision dépend plus fortement des nombres de points des réseaux associés aux variables définies sur $[0, \infty[$, que de ceux des réseaux couplés aux intervalles finis. Dans le cas des coordonnées de Hylleraas normalisées, améliorer la précision nécessite donc surtout d'augmenter le nombre de points N_z .

Le calcul avec les coordonnées de Jacobi est celui qui converge le plus vite en fonction de la taille de la base. Ceci découle du très petit nombre de points N_x nécessaire pour la coordonnée d'origine angulaire ($N_x = 1$). A N_r et N_R fixés, augmenter la taille N_x de ce réseau ne modifie pas l'erreur sur la valeur de l'énergie. Ceci est propre au choix du potentiel d'oscillateur harmonique. En effet, bien que les potentiels d'interaction V_{ij} dépendent de la coordonnée angulaire x , la somme des trois potentiels en est indépendante. De plus la fonction d'onde de l'état fondamental, qui a la forme d'un produit de gaussiennes, est indépendante de la coordonnée angulaire x lorsqu'elle est exprimée en fonction des coordonnées de Jacobi. Ceci induit qu'un réseau de Lagrange contenant un point (et donc une fonction de Lagrange) est suffisant pour représenter cette coordonnée. Le remplissage de la matrice hamiltonienne est également fortement réduit par rapport aux coordonnées de Hylleraas normalisées, en partie seulement grâce au choix $N_x = 1$.

Le système de coordonnées relatives étant très proche des coordonnées de Jacobi, nous pouvons comparer leurs résultats. La première différence provient de la précision sur la valeur de l'énergie. Une précision fixée nécessite en effet de plus grandes bases de Lagrange avec les coordonnées relatives. Dans ce cas-ci également le potentiel d'oscillateur harmonique constitue un exemple particulier qui n'est pas très représentatif de l'utilisation des coordonnées relatives sur réseaux de Lagrange. En effet, bien que, contrairement au cas des coordonnées de Jacobi, le potentiel présente une dépendance en la coordonnée angulaire x , cette dépendance est purement linéaire dans le cas du potentiel d'oscillateur harmonique. Ceci a pour conséquence que l'intégrale sur x dans les éléments de matrice du potentiel est évaluée exactement en utilisant la règle de quadrature de Gauss associée au réseau de Legendre décrivant cette coordonnée. Les fonctions de Lagrange-Legendre prenant la forme de polynômes en x de degré $N_x - 1$, les éléments de matrice du potentiel d'oscillateur harmonique ne font intervenir que des intégrales de polynômes de degré inférieur ou égal à $2N_x - 1$, pour lesquelles la règle de quadrature de Gauss à N_x points est exacte (annexe A). Ceci accélère donc la convergence des calculs du problème à trois corps en ce qui concerne la dépendance en x des fonctions d'onde. Le nombre de points N_x doit être plus grand que 1 car, contrairement au cas des coordonnées de Jacobi, la fonction d'onde de l'état fondamental du système à trois corps exprimée dans les coordonnées relatives dépend de la variable x . En ce qui concerne le nombre d'éléments non nuls dans la matrice hamiltonienne, il est évidemment beaucoup plus important dans le calcul avec les coordonnées relatives, à cause du terme de polarisation de masse. Comparativement aux coordonnées de Hylleraas normalisées, le système de coordonnées relatives fournit une précision légèrement améliorée pour une taille N_T de base fixée, pour un remplissage du même ordre de grandeur.

Dans le cas des coordonnées périmétriques, contrairement aux autres systèmes de coordonnées, les trois particules sont traitées de façon complètement symétrique, ce qui induit que la convergence des résultats est la même en fonction des trois nombres de points N_i des réseaux de Laguerre. C'est pourquoi nous les prenons égaux $N_1 = N_2 = N_3$. Ceci découle aussi du choix des masses identiques pour les trois particules. A taille N_T de base de Lagrange fixée, la précision sur l'énergie est meilleure que dans les cas des coordonnées relatives et de Hylleraas. Le remplissage de la matrice hamiltonienne est quant à lui du même ordre de grandeur que pour les coordonnées relatives et de Hylleraas normalisées pour de faibles précisions, mais est réduit par rapport à ces deux systèmes de coordonnées lorsque la précision recherchée augmente.

6.4.2 Potentiels gaussiens

Le potentiel d'oscillateur harmonique ne représente pas un bon choix pour étudier le système de coordonnées de Jacobi, puisque la somme des trois potentiels est alors indépendante de l'une des coordonnées. C'est pourquoi nous comparons également les quatre systèmes de coordonnées à l'aide de potentiels de type gaussien

$$V_{ij} = -2e^{-0.5r_{ij}^2}. \quad (6.49)$$

L'énergie de l'état fondamental du système à trois corps avec ces potentiels d'interaction n'est pas connue exactement. Néanmoins quelques calculs sur réseaux de Lagrange avec de grandes tailles de base ($N_T = 8000$ avec les coordonnées périmétriques) nous fournit l'estimation suivante $E = -0.704\,924\,422$, que nous utilisons comme valeur de référence. Au tableau 6.2 sont indiquées les erreurs sur cette énergie obtenues avec les quatre systèmes de coordonnées. Chaque calcul correspond à la taille de base minimum nécessaire pour obtenir une erreur absolue de l'ordre de $10^{-7} - 10^{-8}$. Si nous ne considérons que la

TAB. 6.2 – Erreurs ϵ sur l'énergie de l'état fondamental d'un système de trois particules sans spin de masse $m = 1$, avec des potentiels gaussiens (6.49), obtenues par un calcul sur réseaux de Lagrange avec différents systèmes de coordonnées. La valeur de référence de cette énergie est $E = -0.704\,924\,422$.

Coordonnées	N_1	N_2	N_3	h_1	h_2	h_3	N_T	ϵ	\mathcal{N}
Relatives	16	14	14	0.2	0.2		3136	$-6\,10^{-7}$	1 884 736
	20	18	18	0.2	0.2		6480	$-6\,10^{-8}$	6 408 720
Hylleraas	8	12	18			0.3	1728	-10^{-7}	590 976
	10	12	18			0.3	2160	$-7\,10^{-8}$	816 480
Jacobi	10	14	14	0.2	0.2		1960	$3\,10^{-7}$	70 560
	12	14	14	0.2	0.2		2352	$7\,10^{-8}$	89 376
Périmétriques	10	10	10	0.4	0.4	0.4	1000	$2\,10^{-7}$	271 000
	12	12	12	0.4	0.4	0.4	1728	10^{-8}	686 016

taille de la base de Lagrange, nous constatons que le système de coordonnées

périmétriques est le plus intéressant puisqu'environ 1500 fonctions de Lagrange nous fournissent la précision recherchée. Les coordonnées de Jacobi et de Hylleeraas normalisées nécessitent quant à eux approximativement 2000 fonctions. Par contre le système de coordonnées relatives présente une convergence beaucoup plus lente que dans le cas du potentiel d'oscillateur harmonique. En effet une précision de l'ordre de $10^{-7} - 10^{-8}$ requiert dans ce cas-ci environ 4000 fonctions de base, et en particulier un plus grand nombre de points de réseau associés à la coordonnée angulaire x . Le potentiel d'oscillateur harmonique représente pour ces coordonnées un exemple trop simple, pour les raisons décrites précédemment. L'exemple des potentiels gaussiens est donc plus représentatif des tailles de base requises dans un calcul avec les coordonnées relatives.

Si nous prenons aussi en compte le remplissage de la matrice hamiltonienne, le système de coordonnées de Jacobi revient en première place car le nombre d'éléments non nuls de la matrice est dans ce cas inférieur à ceux des autres systèmes de coordonnées. Les coordonnées périmétriques viennent juste après avec près de dix fois plus d'éléments dans la matrice hamiltonienne pour une même précision, bien que la taille de base soit inférieure. Le système de coordonnées relatives nécessitant des tailles de base beaucoup plus grandes que les trois autres systèmes, le remplissage y est également le plus important pour une précision fixée. Nous avons vérifié que ces commentaires sont encore valables pour d'autres types de potentiel d'interaction réguliers.

6.4.3 Potentiels coulombiens

Le problème posé par la présence de singularités dans les potentiels peut être examiné sur base de la définition des différents systèmes de coordonnées. Pour illustrer cette analyse nous considérons l'exemple constitué des trois potentiels coulombiens attractifs

$$\begin{aligned} V_{13} &= -1/r_{13} \\ V_{23} &= -1/r_{23} \\ V_{12} &= -1/r_{12} \end{aligned} \tag{6.50}$$

avec $m_i = 1$ ($i = 1, 2, 3$). Cet exemple ne correspond pas à un problème réaliste, puisqu'il n'existe aucun système physique à trois corps pour lequel les trois interactions coulombiennes sont attractives. Néanmoins cet exemple convient pour étudier le problème des singularités dans les potentiels. Nous renvoyons le lecteur au chapitre 8 pour une étude de systèmes coulombiens à trois corps. L'énergie de l'état fondamental de ce système à trois corps est déterminé en utilisant une base de 8000 fonctions de Lagrange avec les coordonnées périmétriques, et vaut approximativement $E = -1.071\,779\,3730$. Les résultats obtenus avec les quatre systèmes de coordonnées sont présentés au tableau 6.3.

Comme nous l'avons vu aux chapitres précédents, la perte de précision due à une singularité peut être évitée par l'emploi d'un facteur de régularisation. Dans le cas des coordonnées relatives, nous constatons d'après (6.8) et (6.10) que les singularités à l'origine des potentiels V_{13} et V_{23} sont automatiquement

TAB. 6.3 – Erreurs ϵ sur l'énergie de l'état fondamental d'un système à trois corps, interagissant via des potentiels coulombiens attractifs (6.50), obtenues par un calcul sur réseaux de Lagrange avec différents systèmes de coordonnées. La valeur de référence de cette énergie est $E = -1.071\,779\,3730$.

Coordonnées	N_1	N_2	N_3	h_1	h_2	h_3	N_T	ϵ
Relatives	14	14	14	0.4	0.4		2 744	$-3\,10^{-3}$
	20	20	20	0.2	0.2		8 000	$7\,10^{-4}$
	26	26	26	0.2	0.2		17 576	$6\,10^{-4}$
Hylleraas	10	10	10			0.6	1 000	$-5\,10^{-8}$
	10	10	12			0.6	1 200	$-5\,10^{-10}$
Jacobi	14	14	14	0.8	0.8		2 744	$-3\,10^{-3}$
	20	20	20	0.8	0.8		8 000	$2\,10^{-4}$
	26	26	26	1.0	1.0		17 576	-10^{-4}
Périmétriques	8	8	8	0.6	0.6	0.6	512	$-5\,10^{-8}$
	10	10	10	0.6	0.6	0.6	1 000	$-3\,10^{-10}$

régularisées par le facteur $r_{13}^2 r_{23}^2$ de l'élément de volume. Par contre une singularité dans le potentiel V_{12} n'est pas régularisée avec ce facteur, et pose donc problème. Un calcul avec les coordonnées relatives sur réseau de Lagrange tel que présenté ici fournit de bons résultats uniquement si le potentiel V_{12} a un comportement régulier. Ceci est illustré par les résultats obtenus avec les potentiels (6.50). L'erreur sur la valeur de l'énergie du système à trois corps reste supérieure à 10^{-4} , même en utilisant plus de 15000 fonctions de base de Lagrange. Cette limitation est entièrement due à la singularité dans le potentiel V_{12} .

Le cas des coordonnées de Jacobi est encore plus défavorable puisque le facteur $r^2 R^2$ de l'élément de volume (6.18) ne permet de régulariser que des singularités dans le potentiel V_{12} . En effet les distances r_{13} et r_{23} prenant une forme relativement compliquée en fonction des coordonnées de Jacobi, des singularités à l'origine dans les potentiels V_{13} et V_{23} (6.20) ne peuvent pas être régularisées facilement. L'utilisation des coordonnées de Jacobi sur réseaux de Lagrange requiert donc des potentiels d'interaction V_{13} et V_{23} strictement réguliers. Dans le cas de l'exemple présenté au tableau 6.3, nous obtenons des résultats similaires à ceux du système de coordonnées relatives, c'est-à-dire que l'erreur sur l'énergie est supérieure à 10^{-4} , même lorsque la taille de la base de Lagrange est augmentée au-delà de 15000 fonctions. Dans le cas des coordonnées de Jacobi, la perte de précision provient des singularités dans les deux potentiels V_{13} et V_{23} .

Les systèmes de coordonnées de Hylleraas normalisées et périmétriques sont quant à eux parfaitement adaptés au traitement de singularités en $1/r$ dans les potentiels. En effet dans ces deux cas l'élément de volume (6.13) ou (6.22) régularise naturellement ce type de singularités à l'origine dans les trois potentiels d'interaction (6.15) ou (6.24). Dans l'exemple des potentiels coulombiens (6.50), la convergence des résultats est aussi bonne que dans le cas des poten-

tiels réguliers, et l'erreur sur l'énergie est déjà de l'ordre de 10^{-10} avec environ 1000 fonctions de Lagrange, à la fois avec les coordonnées périmétriques et de Hylleraas normalisées. Ceci favorise l'utilisation de ces deux systèmes de coordonnées en physique atomique et moléculaire, où les particules interagissent via la force coulombienne.

6.5 Conclusions

Nous avons présenté quatre systèmes de coordonnées adaptés à l'étude de systèmes à trois corps : les coordonnées relatives, de Hylleraas normalisées, de Jacobi et périmétriques. Nous avons ensuite couplé chacune de ces coordonnées à un réseau de Lagrange afin de comparer le traitement d'un problème à trois corps par la méthode des réseaux de Lagrange en fonction du système de coordonnées. Pour cette comparaison nous avons considéré la détermination de l'énergie de l'état fondamental d'un système à trois corps sans spin, et nous avons utilisé des potentiels d'oscillateur harmonique, pour lesquels la valeur exacte de l'énergie est connue, des potentiels gaussiens et des potentiels de type coulombien.

Les résultats obtenus et une analyse des différentes coordonnées nous indiquent que le système de coordonnées de Jacobi est le plus performant pour un traitement sur réseau de Lagrange, en ce qui concerne à la fois la précision pour une taille de base de Lagrange fixée, et le remplissage de la matrice hamiltonienne, à condition qu'au moins deux des trois interactions soient non singulières. Si un seul des potentiels est régulier, les coordonnées de Jacobi sont exclues, et le système de coordonnées relatives peut prendre la relève. Les tailles de base nécessaires, ainsi que le remplissage de la matrice, sont dans ce cas plus importants pour une précision fixée. Dans le cas des systèmes atomiques et moléculaires à trois corps, la présence de l'interaction coulombienne dans les trois potentiels rend ces deux systèmes de coordonnées inadéquats pour un calcul sur réseau de Lagrange. L'ensemble des coordonnées périmétriques prend alors tout son intérêt puisque les singularités en $1/r$ sont automatiquement régularisées par l'élément de volume. Ce système de coordonnées est également plus intéressant que les coordonnées de Hylleraas normalisées, principalement en ce qui concerne la précision à taille de base fixée.

Chapitre 7

Systemes à trois corps en physique nucléaire

7.1 Introduction

Nous nous intéressons dans ce chapitre aux problèmes à trois corps en physique nucléaire. L'étude de systèmes de nucléons présente deux particularités, qui sont l'importance du spin et le principe de Pauli. Le spin des particules joue en effet un grand rôle en physique nucléaire : le spectre d'un noyau ne peut pas être analysé correctement sans considérer le spin de tous les nucléons le constituant [MJ57]. L'influence du spin se fait principalement via les termes d'interaction spin-orbite qui couplent le spin des nucléons avec leur moment cinétique orbital. L'état d'un système de nucléons est donc caractérisé par la valeur du moment cinétique total, qui résulte de la composition du spin total et du moment cinétique orbital total. Le principe de Pauli, quant à lui, impose à la fonction d'onde totale décrivant l'état d'un système de fermions identiques, d'être antisymétrique vis-à-vis de l'échange de deux de ces particules [CDL73]. Les nucléons étant des fermions, la fonction d'onde totale, qui décrit l'état d'un noyau doit alors être antisymétrique pour toute permutation de deux nucléons, c'est-à-dire l'échange de toutes leurs propriétés. En outre l'analyse de systèmes de nucléons requiert souvent des interactions dépendant des moments cinétiques orbitaux relatifs entre particules.

Dans ce chapitre, nous utilisons un modèle à trois corps pour étudier certains noyaux. Dans notre modèle, nous représentons le noyau sous la forme d'un cœur ponctuel interagissant avec deux nucléons extérieurs. Ce modèle simple permet par exemple d'étudier les noyaux à halo de neutrons tels que les noyaux ${}^6\text{He}$, ${}^{11}\text{Li}$ et ${}^{14}\text{Be}$ [BKV94, Bay97]. Ces noyaux à halo présentent des propriétés telles qu'une faible énergie de liaison et un grand rayon de masse, qui est lié à la forte probabilité de trouver deux neutrons loin des autres nucléons. Bien entendu, ce modèle à trois corps ne permet d'étudier que les propriétés de ces noyaux qui découlent de leur structure en halo. Une étude plus approfondie nécessite la prise en compte de la structure interne du cœur, et donc l'utilisation de modèles plus élaborés tel que le modèle microscopique en amas [WT77, Lan94] dans lequel tous les nucléons sont considérés, ce qui revient à traiter un problème à A corps, où A est le nombre de nucléons.

Pour étudier un système nucléaire dans notre modèle à trois corps, nous considérons les coordonnées relatives (6.4). Les potentiels d'interaction cœur-nucléon peuvent en effet contenir un terme coulombien, et également présenter une dépendance en le moment cinétique orbital des deux nucléons extérieurs relativement au cœur. Ceci exclut donc l'utilisation des systèmes de coordonnées de Jacobi, de Hylleraas normalisées et périmétriques (voir le chapitre 6).

Le but de ce chapitre est d'une part de généraliser la méthode utilisée dans [Bay97] à un calcul "tout réseau". Dans l'article [Bay97], seule la partie radiale des fonctions d'onde est associée à un réseau de Lagrange, la partie angulaire étant traitée analytiquement, c'est pourquoi nous qualifions cette méthode de mixte. L'idée du calcul "tout réseau" est d'associer également un réseau de Lagrange à une coordonnée angulaire, de la même manière qu'au chapitre 6. D'autre part, nous étendons le modèle de l'article [Bay97] au cas d'interactions nucléon-nucléon contenant un terme spin-orbite et un terme tensoriel.

Pour les exemples numériques nous choisissons le cas du noyau ${}^6\text{He}$. Pour la comparaison des méthodes mixte et "tout réseau", nous considérons pour simplifier des potentiels indépendants du moment cinétique orbital relatif. Les résultats numériques n'ont dans ce cas aucun rapport avec la physique du problème, mais permettent d'analyser la convergence et le remplissage de la matrice hamiltonienne des deux méthodes. Afin de présenter des résultats plus réalistes, nous effectuons un autre calcul en utilisant des potentiels dépendant du moment cinétique orbital relatif l , mais nous nous contentons toutefois d'une approximation locale telle que celle utilisée dans les références [BKV94, Bay97]. L'utilisation des coordonnées relatives, qui ne sont pas des coordonnées orthogonales, induit en effet la non-localité des potentiels dépendant de l dans le modèle. Néanmoins, comme l'indiquent les résultats présentés dans ces références, l'approximation locale de ces termes constitue une bonne approximation pour le problème considéré ici. Ce calcul nous sert également à étudier le traitement de termes spin-orbite et tensoriel dans l'interaction entre les deux nucléons extérieurs.

7.2 Modèle à trois corps

Pour étudier le système nucléaire à trois corps constitué d'un cœur et de deux nucléons, nous considérons les coordonnées relatives entre le cœur et les deux nucléons (voir le chapitre 6). Le hamiltonien relatif de ce système, c'est-à-dire après l'élimination du mouvement du centre de masse, est alors donné par (6.1) et (6.6)

$$H = \frac{p_1^2}{2\mu_{cn}} + \frac{p_2^2}{2\mu_{cn}} + \frac{1}{m_c} \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 + U_{cn}(\mathbf{r}_1) + U_{cn}(\mathbf{r}_2) + V_{nn}(\mathbf{r}_{12}) \quad (7.1)$$

où \mathbf{r}_i représente la coordonnée du nucléon i par rapport au cœur c , \mathbf{p}_i est l'impulsion associée, et $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Nous supposons ici que tous les nucléons ont une même masse, que nous dénotons m_N . La masse du cœur est alors égale à $A_c m_N$, où A_c est le nombre de masse du cœur, et la masse réduite cœur-nucléon μ_{cn} vaut $\frac{A_c m_N}{A_c + 1}$.

L'interaction cœur-nucléon U_{cn} est choisie de la forme suivante

$$U_{cn}(\mathbf{r}_i) = U_{cn}^c(r_i) + U_{cn}^{so} \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i, \quad (7.2)$$

c'est-à-dire la somme d'un terme central et d'un terme spin-orbite. Ce dernier fait intervenir le spin \mathbf{s}_i et le moment cinétique orbital \mathbf{l}_i du nucléon. Ce moment cinétique orbital peut s'écrire en fonction des coordonnées relatives selon

$$\mathbf{l}_i = \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i + \frac{1}{A_c + 1} \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_j \quad (7.3)$$

où j est différent de i . L'interaction V_{nn} entre les deux nucléons extérieurs est choisie de la forme

$$V_{nn}(r_{12}) = V_{nn}^c(r_{12}) + V_{nn}^{so}(r_{12}) \mathbf{l}_{12} \cdot \mathbf{S} + V_{nn}^T(r_{12}) r_{12}^2 S_{12}. \quad (7.4)$$

Ce potentiel comprend donc, en plus des termes central V_{nn}^c et spin-orbite V_{nn}^{so} , un terme tensoriel V_{nn}^T . Le terme spin-orbite fait intervenir le spin total \mathbf{S} des deux nucléons, $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$, et leur moment cinétique orbital relatif

$$\mathbf{l}_{12} = \frac{1}{2} (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2). \quad (7.5)$$

Le terme tensoriel dépend quant à lui de l'opérateur S_{12} qui peut s'écrire [CDL73]

$$\begin{aligned} S_{12} &= 12 \frac{(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{r}_{12})(\mathbf{s}_2 \cdot \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^2} - 4 \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \\ &= 4 \sqrt{\frac{6\pi}{5}} S^{(2)} \cdot Y^{(2)} \end{aligned} \quad (7.6)$$

où la deuxième ligne fait apparaître le produit scalaire de deux OTI (opérateurs tensoriels irréductibles [Ros61]) de rang 2, correspondant respectivement au spin total et à une harmonique sphérique. Puisque nous considérons le cœur, constitué de plusieurs nucléons, ponctuel, le principe d'antisymétrisation de Pauli ne peut pas être appliqué exactement. C'est pour cette raison que l'interaction effective cœur-nucléon présente souvent des états liés non physiques, appelés états interdits, qui servent à simuler le principe d'antisymétrisation entre le nucléon et le cœur. L'origine de ces états interdits peut être comprise en effectuant une analogie avec le modèle en couches. Dans ce cas ces états représentent les orbitales occupées par les nucléons du cœur, et qui sont donc inaccessibles aux deux nucléons extérieurs. La présence de ces états liés non physiques à deux corps conduit à un spectre irréaliste pour le système à trois corps. Ces états interdits doivent donc être éliminés. Une technique permettant cette élimination consiste à utiliser un pseudo-potentiel [KNOS83] qui augmente fortement l'énergie de ces états interdits, ceux-ci se retrouvant finalement dans la partie haute énergie du spectre du système. Ces états non physiques peuvent également être éliminés en appliquant des transformations de supersymétrie sur le potentiel cœur-nucléon [HBS99], ce qui nous fournit un nouveau potentiel cœur-nucléon équivalent en phase au potentiel initial mais

sans état non physique. Bien entendu, ces états liés non physiques correspondant à des valeurs particulières du moment cinétique orbital, leur élimination introduit une dépendance en ce moment cinétique dans le potentiel.

Nous allons maintenant examiner les symétries du système à trois corps. Dans la suite de ce chapitre, nous supposons que les deux nucléons extérieurs sont des neutrons, et que la paire formée par ceux-ci a un moment cinétique total J égal à zéro et une parité positive. Le moment cinétique orbital total L et le spin total S des deux neutrons sont alors égaux, et valent soit zéro soit un. Ceci constitue une approximation raisonnable en ce qui concerne les noyaux à halo ${}^6\text{He}$, ${}^{11}\text{Li}$ et ${}^{14}\text{Be}$ car le noyau à halo et le cœur ont le même moment cinétique total et le même parité dans chaque cas [ABW97].

7.3 Fonctions de base et éléments de matrice

Nous analysons ici les fonctions de base sur réseaux de Lagrange utilisées pour étudier l'état fondamental du système à trois corps, dans les cas des méthodes mixte et "tout réseau". Avec ces fonctions de base nous évaluons les éléments de matrice des différents termes apparaissant dans le hamiltonien (7.1), avec les potentiels (7.2) et (7.4). Puisque nous ne considérons plus uniquement des états de moment cinétique orbital total L nul comme au chapitre précédent, le système à trois corps présente six degrés de liberté (après l'élimination du mouvement du centre de masse). Six variables indépendantes sont donc nécessaires pour caractériser la fonction d'onde d'un état du système.

7.3.1 Méthode mixte

La méthode mixte est la méthode utilisée dans les articles [MV94, BKV94, Bay97]. Elle consiste à choisir pour représenter les six degrés de liberté, les coordonnées sphériques décrivant les deux vecteurs cœur-neutron \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 . Ces coordonnées sont donc explicitement $r_1, \Omega_1 = (\theta_1, \varphi_1), r_2, \Omega_2 = (\theta_2, \varphi_2)$. Nous qualifions cette méthode de mixte car elle couple l'utilisation d'un réseau de Lagrange pour les variables radiales r_1 et r_2 , avec un traitement analytique des coordonnées angulaires Ω_1 et Ω_2 .

Les fonctions de base de cette méthode s'écrivent sous la forme

$$\Phi_{i_1 i_2}^S = [[Y_l(\Omega_1) \otimes Y_l(\Omega_2)]^L \otimes \chi^S]^{00} F_{i_1 i_2}(r_1, r_2) \quad (7.7)$$

où Y_l est une harmonique sphérique et χ^S est un état de spin S . Un même moment cinétique orbital relatif l est utilisé pour les deux neutrons car la parité de la paire formée par ceux-ci est supposée positive. La fonction radiale $F_{i_1 i_2}$ correspond à une fonction de Lagrange à deux dimensions que nous définissons égale à

$$F_{i_1 i_2}(r_1, r_2) = N_{i_1 i_2} h^{-1} [f_{i_1}(r_1/h) f_{i_2}(r_2/h) + f_{i_2}(r_1/h) f_{i_1}(r_2/h)] \quad (7.8)$$

avec

$$N_{i_1 i_2} = [2(1 + \delta_{i_1 i_2})]^{-1/2}. \quad (7.9)$$

Les fonctions f_i sont des fonctions de Lagrange associées à un réseau de Laguerre de N points, et h est le facteur d'échelle. Comme au chapitre précédent nous utilisons les fonctions de Lagrange régularisées (voir les équations (2.109) et (2.122)), le facteur de régularisation provenant de l'élément de volume. Ce dernier devient alors

$$dV = dr_1 dr_2 d\Omega_1 d\Omega_2. \quad (7.10)$$

Dans (7.8) nous avons explicitement tenu compte de la symétrie d'échange des deux neutrons. Un même réseau de Laguerre et un même facteur d'échelle sont utilisés pour les deux coordonnées radiales r_1 et r_2 afin de bénéficier des conditions de Lagrange lorsque ces deux coordonnées sont permutées dans la fonction $F_{i_1 i_2}$. Puisque les deux neutrons sont identiques, les indices i_1 et i_2 dans (7.8) sont contraints par $i_2 \leq i_1$. Les fonctions de base (7.7) sont orthonormées à l'approximation de Gauss vis-à-vis de l'élément de volume (7.10).

La fonction d'essai du calcul variationnel prend la forme d'une combinaison linéaire des fonctions de base (7.7)

$$\Psi = \sum_{S l i_1 i_2} C_{l i_1 i_2}^S \Phi_{l i_1 i_2}^S \quad (7.11)$$

où les coefficients $C_{l i_1 i_2}^S$ sont des paramètres variationnels. La somme sur S va de 0 à 1, et la somme sur l est limitée à une certaine valeur l_{max} . Les sommes sur i_1 et i_2 portent sur les N points du réseau de Laguerre, en vérifiant la condition $i_2 \leq i_1$. Les fonctions de base (7.7) ne présentent pas le bon comportement à l'origine en $r_1^{l+1} r_2^{l+1}$. Ce comportement doit donc être simulé par des combinaisons des différentes fonctions de base (cf chapitre 4). Ceci induit que l'utilisation de valeurs l_{max} plus grandes que N n'est pas très utile. La base des fonctions (7.7) pour le calcul variationnel comprend donc

$$N_T = \frac{N(N+1)}{2} (2l_{max} + 1) \quad (7.12)$$

fonctions, puisque lorsque $S = 1$ la valeur $l = 0$ n'est pas possible dans la fonction (7.7) en raison de la relation triangulaire entre les moments cinétiques l , l et L , et de $L = S$.

Eléments de matrice

Nous examinons maintenant les éléments de matrice de quelques termes du hamiltonien (7.1) dans la base (7.7). Les éléments de matrice des opérateurs dérivée seconde de l'énergie cinétique sont donnés par

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{l i_1 i_2}^S | \mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2 | \Phi_{l' i'_1 i'_2}^{S'} \rangle \approx \hbar^2 \delta_{SS'} \delta_{ll'} h^{-2} [\delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} l(l+1) (r_{i_1}^{-2} + r_{i_2}^{-2}) \\ + N_{i_1 i_2} N_{i'_1 i'_2} (T_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} + T_{i_2 i'_2} \delta_{i_1 i'_1} + T_{i_1 i'_2} \delta_{i_2 i'_1} + T_{i_2 i'_1} \delta_{i_1 i'_2})], \end{aligned} \quad (7.13)$$

où T_{ij} représente les termes cinétiques à une dimension. Cette expression est similaire aux premiers termes de (6.31), la grande différence provenant du terme centrifuge qui est beaucoup plus simple dans ce cas-ci puisque le moment cinétique orbital l est un bon nombre quantique pour les fonctions de base (7.7). Ces éléments de matrice sont non nuls uniquement lorsque $l = l'$, c'est-à-dire

qu'ils ne contribuent au remplissage de la matrice hamiltonienne que dans la partie bloc diagonale de celle-ci.

La partie centrale du potentiel cœur-neutron conduit à une structure strictement diagonale des éléments de matrice correspondants, typique de la méthode des réseaux de Lagrange

$$\langle \Phi_{li_1i_2}^S | U_{cn}^c(r_1) + U_{cn}^c(r_2) | \Phi_{l'i_1'i_2}^{S'} \rangle \approx \delta_{SS'} \delta_{ll'} \delta_{i_1i_1'} \delta_{i_2i_2'} [U_{cn}^c(hr_{i_1}) + U_{cn}^c(hr_{i_2})]. \quad (7.14)$$

Ces éléments dépendent uniquement des valeurs du potentiel U_{cn}^c aux N points r_i du réseau de Laguerre. Le terme spin-orbite de l'interaction cœur-neutron donne lieu à des expressions plus compliquées pour ses éléments de matrice car le moment cinétique \mathbf{l}_i (7.3) dépend des impulsions \mathbf{p}_1 et \mathbf{p}_2 , qui correspondent à des opérateurs différentiels. Ces éléments de matrice sont explicités à l'annexe E. Ils représentent une source importante du remplissage de la matrice hamiltonienne.

Le calcul numérique des éléments de matrice de l'interaction neutron-neutron dans la base des fonctions $\Phi_{li_1i_2}^S$ (7.7) nécessite quant à lui un développement multipolaire de cette interaction [BKV94, Bay97]. Les parties radiales des termes central, spin-orbite et tensoriel du potentiel V_{nn} (7.4) peuvent être développées en multipôles selon

$$V_{nn}(r_{12}) = \sum_{\lambda} P_{\lambda}(\cos \theta_{12}) V_{\lambda}(r_1, r_2), \quad (7.15)$$

où θ_{12} est l'angle entre les vecteurs \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 . Les éléments de matrice de la partie centrale peuvent alors s'écrire

$$\langle \Phi_{li_1i_2}^S | V_{nn}^c | \Phi_{l'i_1'i_2}^{S'} \rangle \approx \delta_{SS'} \delta_{i_1i_1'} \delta_{i_2i_2'} \sum_{\lambda} F_{ll'}^{\lambda S} V_{\lambda}^c(hr_{i_1}, hr_{i_2}), \quad (7.16)$$

où les $F_{ll'}^{\lambda L}$ sont des coefficients de couplage des moments cinétiques angulaires faisant intervenir des coefficients 6j et 3jm,

$$F_{ll'}^{\lambda L} = (-)^{L+\lambda} (2l+1)(2l'+1) \begin{pmatrix} l & l' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{Bmatrix} l & l & L \\ l' & l' & \lambda \end{Bmatrix}. \quad (7.17)$$

Les termes multipolaires dans (7.16) sont simplement évalués aux différents points du réseau. Le terme central de l'interaction V_{nn} est donc diagonal par rapport à i_1 et i_2 mais pas par rapport à l . La somme sur λ est limitée par les différentes règles triangulaires provenant des coefficients $F_{ll'}^{\lambda L}$ (7.17). Comme exposé au chapitre précédent, le traitement de ce terme à l'approximation de Gauss requiert que les potentiels V_{λ}^c ne soient pas singuliers, afin de préserver la précision de la méthode sur réseaux de Lagrange. Les expressions des éléments de matrice des parties spin-orbite et tensorielle de l'interaction V_{nn} sont présentées à l'annexe E. Elles prennent une forme similaire à (7.16), mais avec des coefficients de couplage angulaire plus compliqués. De plus le terme spin-orbite fait apparaître, comme dans le cas du terme spin-orbite de l'interaction cœur-neutron, des opérateurs différentiels agissant sur les variables radiales r_1 et r_2 .

Les éléments de matrice du terme $\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2$ (7.1) s'écrivent

$$\langle \Phi_{l_1 i_1 i_2}^S | \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 | \Phi_{l' i'_1 i'_2}^{S'} \rangle = -\hbar^2 N_{i_1 i_2} N_{i'_1 i'_2} \delta_{SS'} F_{l l'}^{1S} h^{-2} (p_{i_1 i'_1}^N p_{i_2 i'_2}^N + p_{i_1 i'_2}^N p_{i_2 i'_1}^N) \quad (7.18)$$

en fonction des mêmes coefficients $F_{l l'}^{\lambda L}$ que pour la partie centrale de l'interaction neutron-neutron, et les éléments p_{ij}^N correspondent aux opérateurs dérivées premières entre fonctions de Lagrange-Laguerre à une dimension. Ceux-ci sont donnés, comme au chapitre précédent, par les relations (D.5) et (D.6). D'après (7.17), les éléments de matrice (7.18) sont nuls sauf lorsque $l' = l \pm 1$. Ils représentent la source principale d'éléments non nuls de la matrice hamiltonienne.

7.3.2 Méthode “tout réseau”

Dans le cas de la méthode “tout réseau”, nous considérons pour représenter les trois degrés de liberté internes du système, c'est-à-dire ceux décrivant le triangle formé par les trois particules, les mêmes coordonnées relatives qu'au chapitre 6. Il s'agit donc des deux distances cœur-neutron r_1 et r_2 , et du cosinus x de l'angle θ_{12} entre les deux coordonnées relatives. Aux trois degrés de liberté restants, définissant l'orientation dans l'espace du triangle formé par les trois particules, sont associés trois angles d'Euler. Ces angles d'Euler α , β , γ sont définis par les relations suivantes

$$\begin{aligned} \sin \theta_{12} \cos \alpha &= \cos \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) - \cos \theta_2 \sin \theta_1 \\ \sin \theta_{12} \sin \alpha &= \sin \theta_2 \sin(\varphi_2 - \varphi_1) \\ \beta &= \theta_1 \\ \gamma &= \varphi_1 \end{aligned} \quad (7.19)$$

où (θ_i, φ_i) représente la partie angulaire du vecteur cœur-neutron \mathbf{r}_i dans les coordonnées sphériques. Les angles α et γ sont définis sur l'intervalle $[0, 2\pi]$, tandis que β varie sur $[0, \pi]$. L'élément de volume associé à ces angles d'Euler vaut

$$dV = \sin \beta d\alpha d\beta d\gamma. \quad (7.20)$$

Dans le cadre de la méthode “tout réseau” les trois angles d'Euler sont traités analytiquement, alors qu'aux trois variables internes r_1 , r_2 et x sont associés des réseaux de Lagrange. Comme au chapitre 6, nous associons un réseau de Laguerre de N points aux coordonnées radiales, et un réseau de Legendre pour la coordonnée x . La méthode “tout réseau” ne différant de la méthode mixte qu'au niveau des variables angulaires, le traitement des coordonnées radiales r_1 et r_2 est identique dans les deux calculs. Un même réseau de Laguerre de N points est donc utilisé pour ces deux coordonnées, couplé avec les fonctions de Lagrange-Laguerre régularisées. Ceci conduit aux fonctions radiales à deux dimensions définies par l'expression (7.8). La coordonnée x dans la méthode “tout réseau” est quant à elle représentée par un réseau de Legendre de N_x points. Pour déterminer l'expression des fonctions angulaires correspondant aux deux valeurs possibles du spin S , nous effectuons le changement de variables $(\Omega_1, \Omega_2) \rightarrow (x, \alpha, \beta, \gamma)$ dans la partie angulaire des fonctions (7.7). Lorsque le spin total S est nul, la fonction angulaire est indépendante des angles d'Euler, et s'écrit en fonction du polynôme de Legendre $P_l(x)$ de

degré l , l étant le moment cinétique orbital relatif, en la variable $x = \cos \theta_{12}$. Pour traiter la coordonnée x sur réseau de Lagrange, nous remplaçons la base formée des polynômes de Legendre $P_k(x)$ par la base équivalente constituée des fonctions de Lagrange-Legendre $g_k^{N_x}(x)$. La fonction de base de Lagrange pour les trois degrés de liberté internes pour $S = 0$ s'écrit alors, de manière analogue à (6.30)

$$\mathcal{F}_{i_1 i_2 k}^{S=0}(r_1, r_2, x) = F_{i_1 i_2}(r_1, r_2) g_k^{N_x}(x) \quad (7.21)$$

où $F_{i_1 i_2}$ est donnée explicitement par (7.8). Ces fonctions de Lagrange à trois dimensions sont orthonormées à l'approximation de Gauss vis-à-vis de l'élément de volume

$$dV = dr_1 dr_2 dx. \quad (7.22)$$

Les fonctions de base totales correspondant à $S = 0$ sont égales au produit des fonctions de Lagrange (7.21) avec la fonction des angles d'Euler, qui est une constante dans ce cas-ci, et avec la fonction de spin nul $|00\rangle$

$$\Phi_{i_1 i_2 k}^{S=0} = \mathcal{N}^{-1/2} \mathcal{F}_{i_1 i_2 k}^{S=0}(r_1, r_2, x) |00\rangle \quad (7.23)$$

où \mathcal{N} est la norme de la fonction des angles d'Euler par rapport à l'élément de volume (7.20), et vaut donc $8\pi^2$. Les fonctions (7.23) sont alors orthonormées par rapport à l'élément de volume total

$$dV = dr_1 dr_2 dx \sin \beta d\alpha d\beta d\gamma. \quad (7.24)$$

Lorsque le spin total S vaut 1, la partie angulaire des fonctions (7.7) fait apparaître, après les avoir exprimées en fonction des coordonnées x, α, β et γ , une dépendance en x par l'intermédiaire d'un polynôme de Legendre associé d'ordre un, $P_l^1(x)$. La base formée des ces polynômes est équivalente à celle des fonctions de Lagrange couplées à un réseau dont les points sont les zéros du polynôme de Legendre associé $P_{N_x}^1(x)$. Les points de ce réseau sont différents de ceux du réseau de Legendre, ce qui complique le traitement des termes de couplage entre les spins $S = 0$ et $S = 1$, qui font alors intervenir des fonctions de Lagrange-Legendre et de Lagrange-Legendre associées. En effet, les éléments de matrice de ces termes ne prennent pas une forme simple lorsqu'une approximation de Gauss est utilisée puisque, les deux réseaux étant différents, les deux types de fonctions de Lagrange ne satisfont pas les conditions de Lagrange aux mêmes points. Pour éviter cette difficulté, nous utilisons la relation existant entre les polynômes de Legendre et de Legendre associés d'ordre un [AS65]

$$P_k^1(x) = \sqrt{1-x^2} \frac{d}{dx} P_k(x). \quad (7.25)$$

Cette dernière relation nous indique que la base des polynômes de Legendre associés d'ordre un est équivalente à une base de polynômes en x multipliés par $\sqrt{1-x^2}$. Pour représenter la coordonnée x lorsque $S = 1$ nous choisissons le même réseau de Legendre de N_x points que pour $S = 0$, mais nous utilisons des fonctions de Lagrange de la forme

$$g_k^{1, N_x}(x) = \sqrt{\frac{1-x^2}{1-x_k^2}} g_k^{N_x}(x) \quad (7.26)$$

où $g_k^{N_x}$ est la fonction de Lagrange-Legendre. Ces fonctions satisfont les conditions de Lagrange aux N_x points x_k du réseau de Legendre, et définissent une base équivalente à celle des polynômes $P_k^1(x)$. Il faut noter que les fonctions de Lagrange (7.26) ne sont pas exactement orthogonales, contrairement aux fonctions de Lagrange basées sur les polynômes de Legendre associés $P_{N_x}^1$. Elles sont néanmoins orthonormées à l'approximation de Gauss. Les fonctions de base de Lagrange pour les trois variables internes s'écrivent alors

$$\mathcal{F}_{i_1 i_2 k}^{S=1}(r_1, r_2, x) = F_{i_1 i_2}(r_1, r_2) g_k^{1, N_x}(x). \quad (7.27)$$

Ces fonctions de Lagrange sont orthonormées à l'approximation de Gauss vis-à-vis de l'élément de volume (7.22).

Les fonctions de base totales pour $S = 1$ s'écrivent comme le produit des fonctions (7.27) avec une fonction dépendant des angles d'Euler et du spin total $S = 1$

$$\Phi_{i_1 i_2 k}^{S=1} = \mathcal{F}_{i_1 i_2 k}^{S=1}(r_1, r_2, x) G^{S=1}(\alpha, \beta, \gamma). \quad (7.28)$$

La fonction des angles d'Euler $G^{S=1}$, qui contient l'état de spin $S = 1$, est également déterminée en effectuant le changement de variable $(\Omega_1, \Omega_2) \rightarrow (x, \alpha, \beta, \gamma)$ dans la partie angulaire des fonctions (7.7). Nous obtenons ainsi

$$\begin{aligned} G^{S=1}(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{1}{4\pi} & \left[e^{-i\gamma}(\cos \alpha - i \sin \alpha \cos \beta)|11\rangle \right. \\ & + e^{i\gamma}(\cos \alpha + i \sin \alpha \cos \beta)|1-1\rangle \\ & \left. - \sqrt{2}i \sin \alpha \sin \beta|10\rangle \right] \end{aligned} \quad (7.29)$$

où apparaissent les états de spin $|SM_S\rangle$. Cette fonction $G^{S=1}$ est normée par rapport à l'élément de volume des angles d'Euler (7.20).

Nous pouvons finalement écrire les fonctions de base de la méthode "tout réseau" sous la forme unifiée

$$\Phi_{i_1 i_2 k}^S = F_{i_1 i_2}(r_1, r_2) g_k^{S, N_x}(x) G^S(\alpha, \beta, \gamma) \quad (7.30)$$

où la fonction radiale $F_{i_1 i_2}$ est définie par (7.8), et les fonctions angulaires par

$$g_k^{S, N_x}(x) = \begin{cases} g_k^{N_x}(x) & S = 0 \\ \sqrt{\frac{1-x^2}{1-x_k^2}} g_k^{N_x}(x) & S = 1 \end{cases} \quad (7.31)$$

et

$$G^S(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{8\pi}}|00\rangle & S = 0 \\ \frac{1}{4\pi} \left[e^{-i\gamma}(\cos \alpha - i \sin \alpha \cos \beta)|11\rangle \right. \\ \quad \left. + e^{i\gamma}(\cos \alpha + i \sin \alpha \cos \beta)|1-1\rangle \right. \\ \quad \left. - \sqrt{2}i \sin \alpha \sin \beta|10\rangle \right] & S = 1. \end{cases} \quad (7.32)$$

La fonction d'essai du calcul variationnel prend alors la forme d'une combinaison linéaire des fonctions de base (7.30)

$$\Psi = \sum_{S i_1 i_2 k} C_{i_1 i_2 k}^S \Phi_{i_1 i_2 k}^S \quad (7.33)$$

où les coefficients $C_{i_1 i_2 k}^S$ sont des paramètres variationnels. Comme dans le cas de la méthode mixte, la somme sur S va de 0 à 1, et les sommes sur i_1 et i_2 portent sur les N points du réseau de Laguerre, en vérifiant la condition $i_2 \leq i_1$. La somme sur k porte quant à elle sur les N_x points du réseau de Legendre. Le nombre total N_T de fonctions de base du calcul variationnel dans la méthode "tout réseau" vaut donc

$$N_T = N(N+1)N_x. \quad (7.34)$$

Éléments de matrice

Nous pouvons maintenant examiner les expressions des éléments de matrice du hamiltonien dans la base des fonctions (7.30). A l'annexe E, nous donnons les expressions dans les coordonnées $r_1, r_2, x, \alpha, \beta$ et γ des opérateurs p_1^2, p_2^2 et $\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2$ intervenant dans la définition de l'énergie cinétique. Puisque nous traitons exactement la dépendance en les angles d'Euler, nous effectuons les calculs des éléments de matrice en deux étapes. Nous calculons en premier lieu les intégrales sur les trois angles d'Euler apparaissant dans les éléments de matrice. Ceci nous fournit alors des opérateurs agissant uniquement sur les trois coordonnées internes r_1, r_2 et x , dont nous pouvons ensuite calculer les éléments de matrice sur réseaux de Lagrange.

Les opérateurs d'énergie cinétique ne dépendant pas de la valeur du spin total S , leurs éléments de matrice font apparaître un facteur $\delta_{SS'}$. Lorsque le spin total S est nul, les fonctions de base (7.30) ne dépendent pas des angles d'Euler, et l'intégration sur ceux-ci est immédiate. Nous retrouvons dans ce cas l'opérateur cinétique déterminé au chapitre 6 (6.9), dont les éléments de matrice dans la base des fonctions de Lagrange (7.21) sont obtenus à partir des expressions suivantes

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{F}_{i_1 i_2 k}^{S=0} | \mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2 | \mathcal{F}_{i_1' i_2' k'}^{S=0} \rangle &\approx \hbar^2 h^{-2} \delta_{i_1 i_1'} \delta_{i_2 i_2'} \left(\frac{1}{r_{i_1}^2} + \frac{1}{r_{i_2}^2} \right) T_{kk'}^{0,x} \\ &+ \hbar^2 h^{-2} \delta_{kk'} N_{i_1 i_2} N_{i_1' i_2'} (T_{i_1 i_1'} \delta_{i_2 i_2'} + T_{i_2 i_2'} \delta_{i_1 i_1'} \\ &+ T_{i_1 i_2'} \delta_{i_2 i_1'} + T_{i_2 i_1'} \delta_{i_1 i_2'}), \end{aligned} \quad (7.35)$$

et

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{F}_{i_1 i_2 k}^{S=0} | \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 | \mathcal{F}_{i_1' i_2' k'}^{S=0} \rangle &\approx -\hbar^2 h^{-2} N_{i_1 i_2} N_{i_1' i_2'} \left[x_k \delta_{kk'} (p_{i_1 i_1'}^N p_{i_2 i_2'}^N + p_{i_1 i_2'}^N p_{i_2 i_1'}^N) \right. \\ &+ \frac{(-)^{k+k'}}{x_k - x_{k'}} \sqrt{(1-x_k^2)(1-x_{k'}^2)} (1 - \delta_{kk'}) \\ &\times \left(\frac{p_{i_2 i_2'}^N}{r_{i_1}} \delta_{i_1 i_1'} + \frac{p_{i_1 i_1'}^N}{r_{i_2}} \delta_{i_2 i_2'} + \frac{p_{i_1 i_2'}^N}{r_{i_2}} \delta_{i_2 i_1'} + \frac{p_{i_2 i_1'}^N}{r_{i_1}} \delta_{i_1 i_2'} \right) \left. \right] \\ &- \hbar^2 h^{-2} \frac{\delta_{i_1 i_1'} \delta_{i_2 i_2'}}{r_{i_1} r_{i_2}} P_{kk'}^{0,x} \end{aligned} \quad (7.36)$$

qui conduisent à une formule similaire à (6.31). Les éléments $T_{kk'}^{0,x}$ et $P_{kk'}^{0,x}$ sont donnés par les relations suivantes

$$T_{kk}^{0,x} = \frac{(N_x - 1)(N_x + 2)}{3} - \frac{2x_k^2}{3(1 - x_k^2)}, \quad (7.37)$$

$$P_{kk}^{0,x} = \frac{(N_x - 1)(N_x + 2)}{3} x_k - \frac{2x_k^3}{3(1 - x_k^2)}, \quad (7.38)$$

et

$$T_{kk'}^{0,x} = \frac{2(-)^{k+k'}}{(x_k - x_{k'})^2} \sqrt{(1 - x_k^2)(1 - x_{k'}^2)}, \quad (7.39)$$

$$P_{kk'}^{0,x} = (-)^{k+k'} \frac{x_k + x_{k'}}{(x_k - x_{k'})^2} \sqrt{(1 - x_k^2)(1 - x_{k'}^2)} \quad (7.40)$$

lorsque $k \neq k'$. Le moment cinétique orbital relatif l d'un des deux neutrons par rapport au cœur n'étant plus un bon nombre quantique dans la base choisie, les termes centrifuges prennent une forme plus compliquée que dans la méthode mixte (7.13). Il faut noter que les intégrales sur x des opérateurs de (6.9) sont évalués exactement en utilisant la règle de quadrature de Gauss-Legendre à N_x points.

Lorsque le spin total S vaut 1, l'intégration sur les angles d'Euler introduit des termes supplémentaires dans les opérateurs décrivant les termes centrifuges et $\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2$ par rapport au cas $S = 0$. Les expressions des opérateurs définissant l'énergie cinétique sont données par les formules (E.32-E.33) de l'annexe E. Nous pouvons évaluer les éléments de matrice de ces différents opérateurs dans la base des fonctions de Lagrange (7.27). Les éléments de matrice des différents termes de l'énergie cinétique ainsi obtenus lorsque $S = 1$ s'écrivent

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{F}_{i_1 i_2 k}^{S=1} | \mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2 | \mathcal{F}_{i_1' i_2' k'}^{S=1} \rangle &\approx \hbar^2 h^{-2} \delta_{i_1 i_1'} \delta_{i_2 i_2'} \left(\frac{1}{r_{i_1}^2} + \frac{1}{r_{i_2}^2} \right) T_{kk'}^{1,x} \\ &+ \hbar^2 h^{-2} \delta_{kk'} N_{i_1 i_2} N_{i_1' i_2'} (T_{i_1 i_1'} \delta_{i_2 i_2'} + T_{i_2 i_2'} \delta_{i_1 i_1'}) \\ &+ T_{i_1 i_2'} \delta_{i_2 i_1'} + T_{i_2 i_1'} \delta_{i_1 i_2'}, \end{aligned} \quad (7.41)$$

et

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{F}_{i_1 i_2 k}^{S=1} | \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 | \mathcal{F}_{i_1' i_2' k'}^{S=1} \rangle &\approx -\hbar^2 h^{-2} N_{i_1 i_2} N_{i_1' i_2'} \left[x_k \delta_{kk'} (p_{i_1 i_1'}^N p_{i_2 i_2'}^N + p_{i_1 i_2'}^N p_{i_2 i_1'}^N) \right. \\ &+ (-)^{k+k'} \frac{2N_x + 1 - N_x(x_k^2 + x_{k'}^2) - x_k x_{k'}}{(2N_x + 1)(x_k - x_{k'})} (1 - \delta_{kk'}) \\ &\times \left(\frac{p_{i_2 i_2'}^N}{r_{i_1}} \delta_{i_1 i_1'} + \frac{p_{i_1 i_1'}^N}{r_{i_2}} \delta_{i_2 i_2'} + \frac{p_{i_1 i_2'}^N}{r_{i_2}} \delta_{i_2 i_1'} + \frac{p_{i_2 i_1'}^N}{r_{i_1}} \delta_{i_1 i_2'} \right) \left. \right] \\ &- \hbar^2 h^{-2} \frac{\delta_{i_1 i_1'} \delta_{i_2 i_2'}}{r_{i_1} r_{i_2}} P_{kk'}^{1,x}. \end{aligned} \quad (7.42)$$

Les éléments $T_{kk'}^{1,x}$ sont égaux à

$$T_{kk}^{1,x} = \frac{N_x(N_x + 1)}{3} + \frac{4}{3(1 - x_k^2)} \quad (7.43)$$

lorsque $k = k'$, et à

$$T_{kk'}^{1,x} = \frac{2(-)^{k+k'}(1 - x_k x_{k'})}{\sqrt{(1 - x_k^2)(1 - x_{k'}^2)}(x_k - x_{k'})^2} \quad (7.44)$$

lorsque $k \neq k'$. Les termes $P_{kk'}^{1,x}$ apparaissant dans (7.42) sont quant à eux définis par

$$P_{kk}^{1,x} = \frac{x_k}{3(2N_x + 1)}(2N_x^3 - 3N_x^2 - 15N_x - 8) + \frac{4x_k(3 - 2x_k^2)}{3(1 - x_k^2)} \quad (7.45)$$

pour $k = k'$, et par

$$P_{kk'}^{1,x} = (-)^{k+k'}(x_k + x_{k'}) \left[\frac{x_k^2 + x_{k'}^2 - 3x_k x_{k'} + 1}{(x_k - x_{k'})^2} - \frac{(N_x + 1)^2}{2N_x + 1} \right] \quad (7.46)$$

pour $k \neq k'$. Les éléments de matrice (7.41) et (7.42) ne diffèrent donc de (7.35) et (7.36) qu'en ce qui concerne les termes provenant des opérateurs agissant sur la variable x . Nous avons évalué exactement les intégrales sur la variable x , parce que l'utilisation de l'approximation de Gauss sur ces termes conduit à des expressions non hermitiques des éléments de matrice de l'énergie cinétique. Comme dans le cas de la méthode mixte, le terme $\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2$ est la source principale du remplissage de la matrice hamiltonienne. Ce remplissage est encore plus important dans le cas de la méthode "tout réseau" car il n'apparaît pas de règle de sélection sur les valeurs des indices k et k' , comme c'est le cas pour la méthode mixte avec la relation triangulaire entre l, l' et 1 (7.18).

Nous considérons maintenant les éléments de matrice du potentiel cœur-neutron U_{cn} (7.2). La partie centrale de ce potentiel étant indépendante des angles d'Euler et de la coordonnée x , ses éléments de matrice dans la base (7.30) sont obtenus similairement à (7.14) en utilisant l'approximation de Gauss

$$\langle \Phi_{i_1 i_2 k}^S | U_{cn}^c(r_1) + U_{cn}^c(r_2) | \Phi_{i'_1 i'_2 k'}^{S'} \rangle \approx \delta_{SS'} \delta_{kk'} \delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} [U_{cn}^c(hr_{i_1}) + U_{cn}^c(hr_{i_2})]. \quad (7.47)$$

La partie spin-orbite de cette interaction est quant à elle plus compliquée puisqu'il nous faut déterminer l'action de l'opérateur de couplage spin-orbite sur les états de spin $S = 0$ et $S = 1$. De plus cet opérateur couple les deux valeurs du spin total. A nouveau la première étape consiste à effectuer l'intégration sur les trois angles d'Euler afin d'obtenir des opérateurs n'agissant plus que sur les trois coordonnées internes. Les développements de ces calculs et les expressions finales de ces éléments de matrice sont donnés à l'annexe E. Comme pour les termes cinétiques correspondant à $S = 1$, les intégrales sur la coordonnée x de ces opérateurs doivent être évaluées exactement afin de préserver l'hermiticité des éléments de matrice. Le terme spin-orbite de l'interaction cœur-neutron introduit également plus d'éléments non nuls dans la matrice hamiltonienne dans le cas de la méthode "tout réseau" que dans la méthode mixte. Ceci est toujours lié au fait que dans la méthode mixte, l'utilisation d'une base pour laquelle le moment cinétique orbital relatif l est un bon nombre quantique permet d'obtenir certaines relations triangulaires entre les différents moments

cinétiques, ce qui induit une réduction du nombre d'éléments de matrice non nuls d'opérateurs tels que le couplage spin-orbite.

Dans le cas du potentiel neutron-neutron V_{nn} (7.4) il n'est plus nécessaire d'effectuer un développement multipolaire de l'interaction comme c'est le cas dans la méthode mixte. Ceci simplifie fortement le traitement de cette interaction. Si nous considérons la partie centrale de cette interaction, ses éléments de matrice dans la base de fonctions (7.30) sont obtenus directement à l'aide de l'approximation de Gauss, comme au chapitre précédent

$$\langle \Phi_{i_1 i_2 k}^S | V_{nn}^c(r_{12}) | \Phi_{i'_1 i'_2 k'}^{S'} \rangle \approx \delta_{SS'} \delta_{kk'} \delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} V_{nn}^c \left(h \sqrt{r_{i_1}^2 + r_{i_2}^2 - 2r_{i_1} r_{i_2} x_k} \right). \quad (7.48)$$

Ce potentiel est donc non seulement diagonal vis-à-vis des indices i_1 et i_2 des variables radiales, mais également vis-à-vis de l'indice k de la coordonnée angulaire x . Dans le cadre de la méthode "tout réseau" nous ne considérons pas les termes spin-orbite et tensoriel de l'interaction neutron-neutron. Ces termes, étant d'un ordre de grandeur inférieur au terme central, ne contribuent que faiblement à l'énergie du système à trois corps.

7.4 Applications

7.4.1 Comparaison des méthodes mixte et "tout réseau"

Pour comparer les deux traitements sur réseaux de Lagrange du problème à trois corps en physique nucléaire, nous considérons un modèle simple, non réaliste pour le noyau ${}^6\text{He}$. Le système à trois corps est formé d'un cœur représentant la particule α , constituée de deux protons et deux neutrons, et de deux neutrons extérieurs. Les nombres de masse valent donc $A_c = 4$ et $A = 6$. Les unités d'énergie et de longueur sont respectivement le MeV et le fermi (1 fm = 10^{-15} m). Dans ce système d'unités, nous avons

$$\frac{\hbar^2}{2m_N} = 20.736 \text{ MeV fm}^2, \quad (7.49)$$

où m_N est la masse du nucléon.

Pour simplifier le problème nous choisissons une interaction effective α -neutron indépendante du moment cinétique orbital l . Ses parties centrale et spin-orbite s'écrivent comme des sommes de gaussiennes

$$U_{cn}^c(r) = -96.3e^{-0.36r^2} + 77e^{-0.9r^2} + 34e^{-0.2r^2} - 85e^{-0.53r^2} + 51e^{-2.5r^2}, \quad (7.50)$$

et

$$U_{cn}^{so}(r) = -16.8e^{-0.52r^2} - 14e^{-0.396r^2} + 14e^{-2.2r^2}. \quad (7.51)$$

Ces potentiels correspondent au potentiel de Kanada [KKNN79] (voir les équations (7.54) et (7.55)) représentant l'interaction α -neutron pour l'onde $l = 0$. Ce potentiel présente un état interdit servant à simuler l'antisymétrisation de Pauli entre le cœur et le neutron [Bay97]. L'utilisation de ce potentiel dans nos

calculs induit que l'état fondamental du noyau ${}^6\text{He}$ dans le modèle est très fortement lié (voir tableau 7.1). C'est pour cette raison que nous qualifions ce calcul de non réaliste, la valeur expérimentale de l'énergie de l'état fondamental de ${}^6\text{He}$ étant -0.975 MeV [Ajz84]. Pour représenter l'interaction neutron-neutron, nous considérons la partie centrale du potentiel nucléon-nucléon utilisé dans [CL92b], qui s'écrit

$$V_{nn}^c(r) = (W + MP^r + BP^\sigma + HP^r P^\sigma)(105.16e^{-r^2/(0.4)^2} - 31.56e^{-r^2/(2.2)^2}) \quad (7.52)$$

où les opérateurs P^r et P^σ sont respectivement les opérateurs de permutation de la coordonnée spatiale et du spin. Les paramètres de mélange W, M, B et H sont choisis en accord avec le potentiel (2) de [CL92b], c'est-à-dire

$$\begin{aligned} W &= 0.4328 & M &= 0.6109 \\ B &= -0.0148 & H &= -0.0288. \end{aligned} \quad (7.53)$$

Au tableau 7.1 est illustrée la convergence de la valeur de l'énergie de l'état fondamental du système à trois corps, en fonction du nombre de points N du réseau de Laguerre et de la valeur maximale du moment cinétique orbital relatif l_{max} pour la méthode mixte, et en fonction de N et du nombre de points N_x du réseau de Legendre pour la méthode "tout réseau". Le nombre

TAB. 7.1 – Energie de l'état fondamental du noyau ${}^6\text{He}$ décrit par un modèle à trois corps avec les potentiels (7.50), (7.51) et (7.52). Le facteur d'échelle h associé au réseau de Laguerre vaut 0.3 fm.

Méthode mixte					
$N \setminus l_{max}$	14	16	18	20	
16	-39.5893	-39.5893			
20	-39.5959	-39.5960	-39.5960	-39.5960	
24	-39.5980	-39.5981	-39.5981	-39.5981	
28	-39.5986	-39.5987	-39.5987	-39.5987	
Méthode "tout réseau"					
$N \setminus N_x$	14	16	18	20	22
16	-39.5908	-39.5897	-39.5895	-39.5894	-39.5894
20	-39.5974	-39.5964	-39.5961	-39.5960	-39.5960
24	-39.5995	-39.5985	-39.5982	-39.5981	-39.5981
28	-39.6001	-39.5991	-39.5988	-39.5987	-39.5987

total N_T de fonctions de base du calcul variationnel est défini par (7.12) dans la méthode mixte, et par (7.34) dans la méthode "tout réseau". Puisque les deux méthodes traitent de la même manière les coordonnées radiales r_1 et r_2 , les différences entre leurs résultats proviennent uniquement du traitement de la partie angulaire. Les résultats obtenus nous indiquent que la méthode "tout réseau" présente une convergence plus lente que la méthode mixte. Un plus grand nombre de fonctions de base angulaire, c'est-à-dire un plus grand

nombre N_x de points de réseau pour la coordonnée x par rapport à l_{max} , est en effet nécessaire pour atteindre la stabilité à N fixé. Par exemple, pour $N = 20$, la stabilité sur les quatre premières décimales est atteinte avec $l_{max} = 16$, ce qui correspond à une base de 6930 fonctions de la méthode mixte, alors que dans le cas de la méthode “tout réseau”, le nombre N_x de points du réseau de Legendre doit être supérieur ou égal à 20, et la base de Lagrange contient alors plus de 8400 fonctions. Remarquons que la convergence est variationnelle avec la méthode mixte et anti-variationnelle avec la méthode “tout réseau”.

Nous pouvons également comparer les deux méthodes du point de vue du remplissage de la matrice hamiltonienne. Au tableau 7.2 sont indiqués les nombres \mathcal{N} d’éléments non nuls de cette matrice pour certains calculs présentés au tableau 7.1. Nous constatons qu’à N fixé, et pour $N_x = l_{max}$, le remplissage

TAB. 7.2 – Nombre \mathcal{N} d’éléments non nuls de la matrice hamiltonienne pour les calculs présentés au tableau 7.1.

N	N_x/l_{max}	Méthode mixte		Méthode “tout réseau”	
		N_T	\mathcal{N}	N_T	\mathcal{N}
16	14	3944	1 378 568	3808	3 523 744
20	16	6930	3 577 370	6720	9 158 720
24	18	11100	7 933 836	10800	20 310 480
28	20	16646	15 733 886	16240	40 248 880

est beaucoup plus grand dans la méthode “tout réseau” que dans la méthode mixte, le nombre d’éléments non nuls de la matrice hamiltonienne dans la méthode “tout réseau” étant plus du double de celui de la méthode mixte. Si nous examinons la situation à taille de base N_T fixée, le remplissage de la matrice est encore augmenté dans la méthode “tout réseau” par rapport à la méthode mixte, en vertu des formules (7.12) et (7.34). Lorsque $N_x = l_{max}$, le nombre N_T de fonctions de base est en effet plus petit dans la méthode “tout réseau” que dans la méthode mixte. L’augmentation du nombre d’éléments non nuls de la matrice hamiltonienne dans le calcul “tout réseau” est dû principalement au terme $\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2$ de l’opérateur cinétique et au terme de couplage spin-orbite de l’interaction cœur-neutron, comme l’indique le tableau 7.3 qui compare les remplissages partiels dus aux différents termes du hamiltonien dans les deux méthodes, pour $N = 20$ et $N_x = l_{max} = 16$. Ceci provient de l’absence de règles de sélection sur les valeurs des indices définissant les fonctions d’onde (7.30) de la base “tout réseau” dans les éléments de matrice de ces deux termes.

La simplicité de la méthode “tout réseau” en ce qui concerne le traitement de l’interaction neutron-neutron, correspondant à une matrice purement diagonale (7.48) (voir tableau 7.3), ne suffit pas à compenser les désavantages de la méthode pour traiter le terme $\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2$ et le terme spin-orbite de l’interaction cœur-neutron. La méthode mixte est donc plus intéressante que la méthode “tout réseau” pour étudier un système à trois corps en physique nucléaire, du point de vue de la convergence des calculs et du remplissage de la matrice hamiltonienne.

TAB. 7.3 – Nombres d’éléments non nuls pour les différents termes du hamiltonien H pour les calculs mixte et “tout réseau”, avec $N = 20$ et $N_x = l_{max} = 16$. La taille N_T de la base vaut alors 6930 pour la méthode mixte et 6720 pour la méthode “tout réseau”.

Méthode	mixte	”tout réseau”
$\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2$	257 730	350 720
$\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2$	2 734 200	5 134 000
U_{cn}^c	6 930	6 720
U_{cn}^{so}	494 300	4 002 080
V_{nn}	114 450	6 720
H	3 577 370	9 158 720

7.4.2 Calcul réaliste de l’état fondamental du noyau ${}^6\text{He}$

Nous étudions maintenant un cas réaliste pour le noyau ${}^6\text{He}$. Puisque la méthode “tout réseau” n’est pas plus avantageuse que la méthode mixte, nous ne considérons que cette dernière méthode dans la suite de ce paragraphe. Pour une analyse physique du noyau ${}^6\text{He}$, nous choisissons une interaction α -neutron dépendant du moment cinétique orbital relatif l . Il s’agit du potentiel de Kanada [KKNN79] qui s’écrit

$$U_{cn}^c(r) = -96.3e^{-0.36r^2} + 77e^{-0.9r^2} + (-)^l(34e^{-0.2r^2} - 85e^{-0.53r^2} + 51e^{-2.5r^2}) \quad (7.54)$$

pour la partie centrale, et

$$U_{cn}^{so}(r) = -16.8e^{-0.52r^2} + (-)^l(-14e^{-0.396r^2} + 14e^{-2.2r^2}) \quad (7.55)$$

pour la partie spin-orbite, toutes deux dépendant de la parité du moment cinétique orbital relatif l . Ce potentiel présente un état interdit dans l’onde $l = 0$, situé à -12.2530 MeV. Celui-ci doit être éliminé afin d’obtenir une énergie de liaison correcte pour le noyau ${}^6\text{He}$. Cette élimination est effectuée en utilisant un pseudo-potentiel [Bay97] qui repousse cet état non physique aux hautes énergies à l’aide d’un facteur Λ (E.24), que nous prenons égal à 5000 MeV. Pour l’interaction neutron-neutron, nous utilisons le potentiel de Hanck [HTB84], qui est un potentiel semi-réaliste de la forme

$$\begin{aligned} V_{nn}(r) = & [V_c^{1+}(r)\frac{1}{2}(1 - P^\sigma) + V_c^{3+}(r)\frac{1}{2}(1 + P^\sigma)]\frac{1}{2}(1 + P^r) \\ & + [V_c^{1-}(r)\frac{1}{2}(1 - P^\sigma) + V_c^{3-}(r)\frac{1}{2}(1 + P^\sigma)]\frac{1}{2}(1 - P^r) \\ & + [V_{ls}^-(r)\mathbf{l} \cdot \mathbf{S} + V_T^-(r)r^2S_{12}]\frac{1}{2}(1 - P^r) \end{aligned} \quad (7.56)$$

où les exposants $+$ et $-$ font référence à la parité du moment cinétique orbital relatif des deux neutrons. Les différentes parties radiales sont des sommes de

gaussiennes, et sont données explicitement par

$$\begin{aligned}
V_c^{1+}(r) &= 150e^{-1.487r^2} - 82.1e^{-0.465r^2} \\
V_c^{3+}(r) &= 280e^{-1.487r^2} - 208e^{-0.639r^2} \\
V_c^{1-}(r) &= 0 \\
V_c^{3-}(r) &= 0 \\
V_{ls}^-(r) &= -142e^{-(\frac{r}{0.85})^2} \\
V_T^-(r) &= 22e^{-r^2} + 0.65e^{-0.25r^2}.
\end{aligned} \tag{7.57}$$

Le potentiel (7.56) ne présente pas de terme tensoriel V_T^+ car les déphasages 3S_1 , correspondant au deuton, sont utilisés pour ajuster les potentiels centraux V_c^{1+} et V_c^{3+} [HTB84]. Les termes spin-orbite V_{ls}^- et tensoriel V_T^- sont quant à eux ajustés pour reproduire les déphasages 3P . Le potentiel (7.56) permet donc l'analyse du traitement de termes spin-orbite et tensoriel dans l'interaction entre les deux neutrons extérieurs dans le calcul à trois corps sur réseaux de Lagrange.

Au tableau 7.4 est présentée la convergence de l'énergie de l'état fondamental de ^6He en utilisant les potentiels décrits plus haut, avec et sans les termes spin-orbite et tensoriel dans V_{nn} , en fonction du nombre de points N du réseau de Laguerre et du nombre maximum l_{max} d'ondes partielles. Le facteur

TAB. 7.4 – Energie obtenue par la méthode mixte pour l'état fondamental du noyau ^6He décrit par un modèle à trois corps, avec et sans les termes spin-orbite et tensoriel dans le potentiel V_{nn} (7.56). Le facteur d'échelle h associé au réseau de Laguerre vaut 0.25 fm.

$V_{nn} = V_{nn}^c$				
$N \setminus l_{max}$	14	16	18	20
16	-0.9024	-0.9042		
20	-0.9106	-0.9124	-0.9133	-0.9139
24	-0.9123	-0.9140	-0.9149	-0.9154
26	-0.9125	-0.9142	-0.9151	-0.9157
$V_{nn} = V_{nn}^c + V_{nn}^{so} \mathbf{l} \cdot \mathbf{S} + V_{nn}^T S_{12}$				
$N \setminus l_{max}$	14	16	18	20
16	-0.9275	-0.9293		
20	-0.9355	-0.9372	-0.9381	-0.9387
24	-0.9371	-0.9387	-0.9396	-0.9402
26	-0.9374	-0.9389	-0.9399	-0.9404

d'échelle h pour le réseau de Laguerre vaut 0.25 fm. Les calculs avec la méthode mixte, après élimination de l'état interdit, nous fournissent une énergie de l'ordre de -0.94 MeV, qui est proche de la valeur expérimentale -0.975 MeV pour l'état fondamental de ^6He . Le faible écart entre ces deux valeurs est quelque peu accidentel comme le montrent les résultats obtenus dans les références [BKV94, Bay97] en utilisant une autre interaction neutron-neutron. Les différences entre les valeurs calculées et la valeur expérimentale de l'énergie ont

deux causes principales : le modèle à trois corps et le choix des interactions, les deux étant reliées puisque le choix du modèle à trois corps impose l'utilisation de potentiels effectifs cœur-neutron. Le modèle à trois corps ne fournit pas une description parfaite du noyau ${}^6\text{He}$, entre autres car l'antisymétrisation entre le cœur et les neutrons du halo y est négligée, et il ne permet pas de considérer des excitations du cœur α . Néanmoins, malgré sa simplicité, ce modèle à trois corps fournit des résultats raisonnables pour le noyau ${}^6\text{He}$, et constitue en ce sens une bonne approximation pour la description de la structure en halo de ce noyau [BKV94, Bay97].

D'après le tableau 7.4 la présence des termes spin-orbite et tensoriel dans V_{nn} ne ralentit pas la convergence des calculs en fonction de N et l_{max} . Nous pouvons examiner en détails les modifications introduites par ces deux termes supplémentaires sur les différents termes du hamiltonien. Au tableau 7.5 sont indiquées les valeurs moyennes dans l'état fondamental, des différentes composantes du hamiltonien dans les deux calculs présentés au tableau 7.4. Nous

TAB. 7.5 – Valeurs moyennes des différents termes du hamiltonien dans l'état fondamental du noyau ${}^6\text{He}$ obtenu par la méthode mixte, avec et sans les termes spin-orbite et tensoriel dans l'interaction neutron-neutron. Les conditions de calcul sont $N = 26$, $l_{max} = 20$ et $h = 0.25$ fm.

	$V_{nn} = V_{nn}^c$			$V_{nn} = V_{nn}^c + V_{nn}^{so} \mathbf{l} \cdot \mathbf{S} + V_{nn}^T S_{12}$		
	$S = 0$	$S = 1$	Total	$S = 0$	$S = 1$	Total
$\langle \mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2 \rangle$	22.4607	4.3936	26.8543	22.3855	4.5219	26.9074
$\langle \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 \rangle$	-1.0372	-0.0511	-1.0883	-1.0297	-0.0468	-1.0765
$\langle V^{pseudo} \rangle$	0.0022	0	0.0022	0.0022	0	0.0022
$\langle U_{cn}^c \rangle$	-16.2849	-3.3802	-19.6651	-16.2384	-3.4889	-19.7273
$\langle U_{cn}^{so} \rangle$	-2.7657		-2.7657	-2.7879		-2.7879
$\langle V_{nn}^c \rangle$	-4.2530	0	-4.2530	-4.2301	0	-4.2301
$\langle V_{nn}^{so} \rangle$	0	0	0	0	-0.1740	-0.1740
$\langle V_{nn}^T \rangle$	0	0	0	0	0.1458	0.1458
$E = \langle H \rangle$	-0.9157			-0.9404		

avons choisi comme exemple le calcul avec $N = 26$ et $l_{max} = 20$. Nous constatons que l'ajout des termes spin-orbite et tensoriel dans V_{nn} modifie les différentes valeurs moyennes de quelques dizaines de keV. Le terme spin-orbite contribue pour -0.17 MeV, tandis que le terme tensoriel contribue pour 0.15 MeV, c'est-à-dire que ces deux termes se compensent fortement. Ceci explique la faible différence de résultat entre les deux calculs au tableau 7.4. Ces valeurs sont en accord avec les ordres de grandeurs attendus, puisque ces termes sont de l'ordre de quelques pourcents par rapport au terme central de l'interaction neutron-neutron.

La répartition de la fonction d'onde de l'état fondamental de ${}^6\text{He}$ dans les différentes ondes partielles l pour les deux valeurs du spin total S , est présentée au tableau 7.6. L'ajout des deux termes d'interaction augmente légèrement la fraction $S = 1$ de la fonction d'onde, qui passe de 14.9% à 15.5% , surtout au détriment de la composante ($S = 0, l = 1$) qui reste la composante principale

TAB. 7.6 – Répartition en % de la fonction d’onde obtenue par la méthode mixte pour l’état fondamental du noyau ${}^6\text{He}$ dans les différentes ondes partielles caractérisées par l et S . Les conditions de calcul sont $N = 26$, $l_{max} = 20$ et $h = 0.25$ fm.

$V_{nn} = V_{nn}^c$						
$S \setminus l$	0	1	2	3	4	5
0	1.30	79.93	3.12	0.54	0.14	0.05
1		14.80	0.08	0	0	0
$V_{nn} = V_{nn}^c + V_{nn}^{sol} \cdot \mathbf{S} + V_{nn}^T S_{12}$						
$S \setminus l$	0	1	2	3	4	5
0	1.27	79.43	3.07	0.53	0.13	0.05
1		15.38	0.07	0	0	0

avec 79.4%. L’augmentation de la composante $S = 1$ est directement reliée au terme spin-orbite de V_{nn} qui ne contribue que pour $S = 1$ et qui est attractif. Le remplissage de la matrice, quant à lui, augmente en présence de ces deux termes supplémentaires dans le hamiltonien. Par exemple, pour $N = 26$ et $l_{max} = 20$, le nombre d’éléments non nuls passe de 11 809 967 à 13 100 577 lorsque les termes spin-orbite et tensoriel sont ajoutés dans le potentiel neutron-neutron.

7.5 Conclusions

Dans ce chapitre nous avons utilisé la méthode des réseaux de Lagrange pour étudier des systèmes nucléaires dans un modèle à trois corps. Dans ce modèle simple le noyau est décomposé en un cœur, supposé ponctuel, et deux nucléons extérieurs. Ce modèle permet par exemple d’étudier certaines propriétés des noyaux à halo de neutrons. Etant donné la dépendance en le moment cinétique orbital relatif des interactions cœur-nucléon réalistes, le problème à trois corps est traité à l’aide des coordonnées relatives.

L’étude effectuée dans ce chapitre, et basée sur un noyau formé d’un cœur et de deux neutrons, comprend deux parties. La première consiste à comparer la méthode utilisée dans l’article [Bay97], appelée ici méthode mixte, à une méthode “tout réseau”. Dans la méthode mixte, seule la partie radiale de la fonction d’onde du système à trois corps est traitée sur réseau de Lagrange, la partie angulaire étant traitée analytiquement. Le but de la méthode “tout réseau” est d’étendre le traitement sur réseau de Lagrange aux trois coordonnées internes, comme au chapitre 6. L’avantage de cette méthode “tout réseau” est de fournir une matrice purement diagonale pour représenter le potentiel d’interaction entre les deux neutrons extérieurs, alors que dans la méthode mixte, le traitement de cette interaction nécessite un développement multipolaire, ce qui conduit à une matrice non diagonale. Cependant cet avantage de la méthode “tout réseau” ne suffit pas à compenser les inconvénients provenant du traitement du terme $\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2$ de l’énergie cinétique et du terme de couplage spin-orbite de l’interaction cœur-neutron. En effet, contrairement au

cas de la méthode mixte, la méthode “tout réseau” ne fait pas apparaître de règle de sélection dans les éléments de matrice de ces deux termes. Il en résulte une forte augmentation du remplissage de la matrice hamiltonienne, le nombre d’éléments non nuls de cette matrice valant plus du double d’une méthode à l’autre. De plus la convergence de la méthode “tout réseau” est ralentie par rapport à la méthode mixte. Un plus grand nombre de fonctions angulaires est en effet nécessaire pour obtenir la convergence à une certaine précision. La méthode “tout réseau” est donc finalement moins intéressante que la méthode mixte pour traiter un système nucléaire à trois corps.

La deuxième partie de l’étude des systèmes à trois corps en physique nucléaire concerne la généralisation du modèle basé sur la méthode mixte au cas d’interactions entre les neutrons extérieurs contenant des termes de couplage spin-orbite et tensoriel. L’ajout de ces termes augmente de quelques pourcents le nombre d’éléments non nuls de la matrice hamiltonienne dans l’exemple de l’étude de l’état fondamental du noyau ${}^6\text{He}$. Cependant la convergence des résultats reste aussi bonne que dans le cas d’une interaction neutron-neutron purement centrale. Bien que dans les tests effectués le terme tensoriel de l’interaction neutron-neutron n’est qu’un potentiel effectif, puisqu’il est purement répulsif, nous considérons que nos conclusions sont encore valables pour des potentiels tensoriels plus réalistes. En effet, non seulement le terme tensoriel est d’un ordre de grandeur inférieur au terme central de l’interaction neutron-neutron, mais de plus il ne contribue à l’énergie du système à trois corps qu’au travers de la composante $S = 1$ de la fonction d’onde. Or celle-ci ne représente qu’environ 15% de l’état fondamental du noyau ${}^6\text{He}$. L’utilisation d’une interaction neutron-neutron comprenant un terme tensoriel réaliste ne devrait donc pas modifier considérablement le taux de convergence de nos calculs. Ceci valide l’utilisation de potentiels nucléon-nucléon contenant en plus du terme central, un terme spin-orbite et un terme tensoriel, dans le modèle à trois corps pour les noyaux.

Chapitre 8

Systemes à trois corps en physique atomique et moléculaire

8.1 Introduction

Dans ce chapitre nous considérons le modèle à trois corps présenté au chapitre 6 pour étudier certains atomes et molécules. Nous supposons ici les particules sans spin. Ceci constitue une approximation valable en physique atomique car le terme de couplage spin-orbite ne contribue que faiblement à l'énergie du système. Ce terme, associé à d'autres d'origine relativiste, conduit à la structure fine des systèmes atomiques [Sob79]. Il peut être traité de manière perturbative [CDL73], et donc calculé à partir de la fonction d'onde obtenue lors de la résolution de l'équation de Schrödinger sans terme de spin. Bien que nous ne prenions pas explicitement en compte le spin du système à trois corps, il peut avoir une influence sur la symétrie de la partie spatiale de la fonction d'onde décrivant l'état du système. Ceci provient du principe d'antisymétrisation de Pauli lorsque le système à trois corps contient des fermions identiques, typiquement des électrons en physique atomique et moléculaire.

Dans le cadre de cette approximation, les états du système à trois corps sont caractérisés par le moment cinétique orbital total L et la parité π . Dans ce chapitre, nous nous intéressons en particulier aux états S ($L = 0$) et P ($L = 1$) de quelques systèmes atomiques et moléculaires tels que l'atome d'hélium, l'ion hydrogène H^- , l'ion positronium Ps^- , l'ion moléculaire d'hydrogène H_2^+ et la molécule $dt\mu$. L'atome d'hélium et l'ion moléculaire d'hydrogène sont les problèmes à trois corps les plus simples respectivement en physique atomique et moléculaire. Ils représentent ainsi de bons exemples pour tester une nouvelle méthode numérique permettant l'étude de systèmes à trois corps. En tant que molécule la plus simple, le système H_2^+ est aussi idéal pour analyser la validité de l'approximation de Born-Oppenheimer [Her50]. Les ions H^- et Ps^- sont également des systèmes à trois corps relativement simples, mais ils ne présentent qu'une faible énergie de liaison. Ils représentent en ce sens des tests plus sévères pour la méthode. L'ion Ps^- , formé d'un positron et de deux électrons, est particulièrement intéressant car il permet d'analyser l'annihilation entre l'électron et son antiparticule, le positron [Ho90]. Enfin, la molécule $dt\mu$, constituée d'un deuton 2H , d'un triton 3H , et d'un muon, est fort étudiée

depuis quelques années pour son rôle important dans la fusion, dans laquelle le muon sert de catalyseur [HMS88].

Dans le cas des systèmes atomiques et moléculaires, les interactions entre les trois corps se réduisent à l'interaction coulombienne. Parmi les quatre systèmes de coordonnées introduits au chapitre 6, seulement deux peuvent être utilisés pour traiter des systèmes à trois corps en physique atomique et moléculaire à l'aide de la méthode des réseaux de Lagrange : les coordonnées de Hylleraas normalisées (6.12) et les coordonnées périmétriques (6.21). Afin de déterminer les coordonnées les plus avantageuses pour un traitement sur réseaux de Lagrange, nous effectuons un test de convergence, tel qu'au chapitre 6, dans le cas réaliste de l'ion positronium Ps^- . Ce système atomique a la particularité d'être composé de trois particules de même masse, et ne possède qu'un état lié, dont la notation est $^1S^e$, d'énergie $-0.262\,005\,070\,233$ hartree [Fro99a]. Il constitue un test plus intéressant que l'atome d'hélium, car étant faiblement lié, son état fondamental présente une grande extension spatiale, et est ainsi plus difficile à reproduire que l'état fondamental de l'atome d'hélium, pour lequel les coordonnées de Hylleraas ont été initialement introduites [BS57].

Au tableau 8.1 est indiquée la convergence de l'énergie de l'état lié de l'ion Ps^- en fonction de la taille N_T de la base de Lagrange dans les cas des coordonnées de Hylleraas normalisées (6.12) et périmétriques (6.21). Les fonctions

TAB. 8.1 – Erreurs sur l'énergie de l'état fondamental de l'ion Ps^- obtenues par un calcul sur réseaux de Lagrange avec les systèmes de coordonnées de Hylleraas normalisées et périmétriques. Les facteurs d'échelle sont $h_z = 1.5$ pour les coordonnées de Hylleraas normalisées, et $h_x = h_y = 1.6$ et $h_z = 1.5$ pour les coordonnées périmétriques. La valeur de référence de cette énergie est $E = -0.262\,005\,070\,233$ hartree [Fro99a].

Coordonnées	N_x	N_y	N_z	N_T	ϵ
Hylleraas	4	4	10	160	10^{-3}
	8	8	28	1 792	10^{-6}
	12	12	48	6 912	10^{-9}
Périmétriques	5	5	4	100	10^{-3}
	13	13	6	1 014	10^{-6}
	22	22	8	3 872	$6\,10^{-10}$

de base et les éléments de matrice du calcul sont décrits au chapitre 6. Les trois calculs pour chaque système de coordonnées correspondent à la taille de base minimale requise pour obtenir une erreur absolue sur l'énergie respectivement de 10^{-3} , 10^{-6} et 10^{-9} . Dans le cas des coordonnées périmétriques, les nombres de points N_x et N_y sont choisis égaux en raison de la symétrie du système Ps^- vis-à-vis de l'échange des deux électrons. Dans le cas des coordonnées de Hylleraas normalisées, le nombre de points N_z doit être choisi plus grand que les nombres N_x et N_y (voir le chapitre 6). Les facteurs d'échelle sont $h_z = 1.5$ pour les coordonnées de Hylleraas normalisées, et $h_x = h_y = 1.6$ et $h_z = 1.5$

pour les coordonnées périmétriques. Les résultats obtenus indiquent que pour une précision de l'ordre de 10^{-3} hartree les tailles des bases de Lagrange sont similaires pour les deux choix de coordonnées. Cependant l'écart entre les deux augmente lorsque la précision recherchée est plus grande. Pour une précision de 10^{-9} hartree, il faut en effet 6912 fonctions de Lagrange avec les coordonnées de Hylleraas normalisées, et seulement 3872 fonctions avec les coordonnées périmétriques. Le système de coordonnées périmétriques se révèle donc plus performant pour traiter un problème coulombien à trois corps à l'aide de la méthode des réseaux de Lagrange. C'est pourquoi nous ne considérons plus que ce système de coordonnées dans la suite de ce chapitre.

8.2 Hamiltonien pour un état de moment cinétique orbital total L

Avant d'introduire les coordonnées périmétriques, que nous utiliserons pour étudier les états S et P de quelques systèmes à trois corps, nous présentons le hamiltonien correspondant à un moment cinétique orbital total L quelconque. Lorsque le mouvement du centre de masse est éliminé, le hamiltonien non-relativiste décrivant un système atomique ou moléculaire à trois corps s'écrit dans les unités atomiques ($\hbar = m_e = e = 1$) sous la forme

$$H = \left(\frac{1}{8\mu_{12}} + \frac{1}{2m_3} \right) p^2 + \frac{P^2}{2\mu_{12}} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) \mathbf{p} \cdot \mathbf{P} + \frac{Z_1 Z_2}{R} + \frac{Z_1 Z_3}{|\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}|} + \frac{Z_2 Z_3}{|\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}|}, \quad (8.1)$$

avec les deux coordonnées $\mathbf{R} = \mathbf{r}_{31} - \mathbf{r}_{32}$ et $\mathbf{r} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_{31} + \mathbf{r}_{32})$, où \mathbf{r}_{3i} est la coordonnée de la particule i par rapport à la troisième particule, et les moments associés \mathbf{P} and \mathbf{p} . Chacune des trois particules est caractérisée par sa masse m_i et son nombre de charge Z_i , et μ_{12} est la masse réduite des particules 1 et 2. Nous n'utilisons pas les coordonnées de Jacobi (6.16) afin d'éviter la dépendance en les masses de l'interaction coulombienne.

Dans le référentiel du centre de masse, un système à trois corps a six degrés de liberté. Ceux-ci peuvent être représentés par trois variables décrivant la forme du triangle défini par les trois particules, et par trois angles d'Euler donnant l'orientation de ce triangle dans l'espace. Nous choisissons, pour les calculs intermédiaires, les variables définies par Feagin [Fea84]. Elles sont formées par les trois coordonnées sphériques (R, θ, ψ) du vecteur \mathbf{R} , et les trois coordonnées cylindriques (ρ, ζ, ϕ) du vecteur \mathbf{r} dans le référentiel relatif où l'axe z est dirigé selon \mathbf{R} . Les trois variables angulaires définissent un ensemble d'angles d'Euler. Les domaines de variation de ces variables sont $[0, \infty[$ pour R et ρ , $]-\infty, +\infty[$ pour ζ , $[0, 2\pi]$ pour ψ et ϕ , et $[0, \pi]$ pour θ . Dans ce système de coordonnées, l'élément de volume est

$$dV = R^2 \rho \sin \theta dR d\rho d\zeta d\psi d\theta d\phi. \quad (8.2)$$

Avec ces variables, le hamiltonien devient

$$\begin{aligned}
H = & T_S + \frac{1}{2\mu_{12}R^2} \left\{ L^2 + \left(\zeta \partial_\rho - \rho \partial_\zeta + \frac{\zeta}{2\rho} \right) (L'_+ - L'_-) \right. \\
& + \left. \left(\frac{\zeta^2}{\rho^2} - 1 + \frac{R^2}{4\rho^2} \right) L_z'^2 + \frac{\zeta}{2\rho} [(L'_+ + L'_-)L'_z + L'_z(L'_+ + L'_-)] \right\} \\
& + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) \frac{1}{\rho R} \left\{ -\frac{\zeta}{\rho} L_z'^2 - \left(\frac{1}{4} + \frac{\rho}{2} \partial_\rho \right) (L'_+ - L'_-) \right. \\
& \left. - \frac{1}{4} [(L'_+ + L'_-)L'_z + L'_z(L'_+ + L'_-)] \right\} + \frac{L_z'^2}{2m_3\rho^2} + V_C(R, \rho, \zeta) \quad (8.3)
\end{aligned}$$

où \mathbf{L} est le moment cinétique orbital total. L'énergie cinétique T_S pour les états S , et le potentiel coulombien V_C sont donnés explicitement par

$$\begin{aligned}
T_S = & \frac{1}{2\mu_{12}R^2} \left[-R^2 \partial_R^2 - 2R \partial_R - \left(\zeta^2 + \frac{R^2}{4} \right) \partial_\rho^2 - \left(\rho^2 + \frac{R^2}{4} \right) \partial_\zeta^2 + 2\rho\zeta \partial_\rho \partial_\zeta \right. \\
& \left. - \frac{1}{\rho} \left(\zeta^2 + \frac{R^2}{4} - \rho^2 \right) \partial_\rho + 2\zeta \partial_\zeta \right] \\
& + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) \frac{1}{\rho R} \left[\zeta \rho \partial_\rho^2 - \rho^2 \partial_\rho \partial_\zeta + \zeta \partial_\rho - 2\rho \partial_\zeta - \rho R \partial_{R\zeta}^2 \right] \\
& + \frac{1}{2m_3} \left[-\partial_\rho^2 - \frac{1}{\rho} \partial_\rho - \partial_\zeta^2 \right], \quad (8.4)
\end{aligned}$$

$$V_C = \frac{Z_1 Z_2}{R} + \frac{Z_1 Z_3}{\sqrt{\left(\zeta + \frac{R}{2}\right)^2 + \rho^2}} + \frac{Z_2 Z_3}{\sqrt{\left(\zeta - \frac{R}{2}\right)^2 + \rho^2}}. \quad (8.5)$$

Les composantes du moment cinétique orbital total dans le référentiel relatif sont notés par un prime. Les deux opérateurs L'_+ et L'_- sont des combinaisons des opérateurs L'_x et L'_y . Ces opérateurs dépendent uniquement des angles d'Euler

$$\begin{aligned}
L'_+ &= -ie^{-i\phi} \left(\cotg \theta \partial_\phi + i\partial_\theta - \frac{1}{\sin \theta} \partial_\psi \right), \\
L'_- &= -ie^{i\phi} \left(\cotg \theta \partial_\phi - i\partial_\theta - \frac{1}{\sin \theta} \partial_\psi \right), \\
L'_z &= -i\partial_\phi.
\end{aligned} \quad (8.6)$$

Nous introduisons maintenant les coordonnées périmétriques (6.21), que nous utilisons pour obtenir des approximations des énergies et des fonctions d'onde des états liés de systèmes à trois corps. Ces trois coordonnées ont l'avantage d'être définies sur l'intervalle $[0, \infty[$. Les variables R , ρ et ζ s'expriment en fonction des coordonnées périmétriques selon

$$\begin{aligned}
R &= \frac{x+y}{2}, \\
\rho^2 &= \frac{xyz(x+y+z)}{(x+y)^2}, \\
\zeta &= \frac{(x-y)(2z+x+y)}{4(x+y)},
\end{aligned} \quad (8.7)$$

et l'élément de volume devient

$$dV = (x + y)(x + z)(y + z) dx dy dz \sin \theta d\psi d\theta d\phi. \quad (8.8)$$

L'élément de volume (6.22) est égal à (8.8) à un facteur près qui provient des angles d'Euler, puisque dans le cas des états S , considérés au chapitre 6, la fonction d'onde est indépendante des angles d'Euler, et intégrer sur ces angles revient alors à multiplier par une constante.

8.3 Fonctions d'onde et propriétés de symétrie

Le hamiltonien étant invariant par rotation, il commute avec le carré du moment cinétique orbital total L^2 , et avec une de ses composantes dans le référentiel fixe, soit L_z . Ces deux opérateurs nous fournissent donc deux bons nombres quantiques (L, M) pour caractériser la fonction d'onde du système. Celle-ci peut alors s'écrire

$$\Psi_{LM} = \sum_{K=-L}^L D_{MK}^{L*}(\psi, \theta, \phi) \bar{\Phi}_K^{(L)}(R, \rho, \zeta), \quad (8.9)$$

où $D_{MK}^L(\psi, \theta, \phi)$ représente un élément de matrice de rotation de Wigner [CDL73], qui est une fonction des angles d'Euler. Les fonctions $\bar{\Phi}_K^{(L)}(R, \rho, \zeta)$ dépendent uniquement des trois variables internes. Exprimées en coordonnées périmétriques, les fonctions $\bar{\Phi}_K^{(L)}$ deviennent

$$\bar{\Phi}_K^{(L)}(R, \rho, \zeta) = \Phi_K^{(L)}(x, y, z). \quad (8.10)$$

La parité est aussi un bon nombre quantique pour le système à trois corps et les états pairs et impairs peuvent être traités séparément. L'opérateur parité Π transforme les six variables $(R, \rho, \zeta, \psi, \theta, \phi)$ selon

$$\begin{array}{lll} R & \xrightarrow{\Pi} & R \\ \rho & \xrightarrow{\Pi} & \rho \\ \zeta & \xrightarrow{\Pi} & \zeta \end{array} \quad \begin{array}{lll} \psi & \xrightarrow{\Pi} & \pi + \psi, \\ \theta & \xrightarrow{\Pi} & \pi - \theta, \\ \phi & \xrightarrow{\Pi} & \pi - \phi. \end{array} \quad (8.11)$$

Les fonctions d'onde des états pairs et impairs peuvent être construites sous la forme

$$\Psi_{LM}^{e/o} = \frac{\Psi_{LM} \pm \Pi \Psi_{LM}}{\sqrt{2}}. \quad (8.12)$$

Dans le cas particulier où deux des trois particules, soient 1 et 2, sont identiques, le hamiltonien est invariant vis-à-vis d'une permutation de ces deux particules. Ceci nous permet de distinguer les états symétriques des états antisymétriques. La transformation des six variables par l'opérateur de permutation P_{12} est donnée par les relations

$$\begin{array}{lll} R & \xrightarrow{P_{12}} & R \\ \rho & \xrightarrow{P_{12}} & \rho \\ \zeta & \xrightarrow{P_{12}} & -\zeta \end{array} \quad \begin{array}{lll} \psi & \xrightarrow{P_{12}} & \pi + \psi, \\ \theta & \xrightarrow{P_{12}} & \pi - \theta, \\ \phi & \xrightarrow{P_{12}} & 2\pi - \phi. \end{array} \quad (8.13)$$

Les fonctions d'onde symétriques et antisymétriques sont alors construites comme

$$\Psi_{LM}^{s/a} = \frac{\Psi_{LM} \pm P_{12}\Psi_{LM}}{\sqrt{2}} \quad (8.14)$$

où les fonctions Ψ_{LM} sont données par (8.9).

8.3.1 Etats S

Dans le cas des états S ($L = M = K = 0$), la fonction d'onde (8.9) devient

$$\Psi_{00} = \bar{\Phi}_0^{(S^e)}(R, \rho, \zeta) = \Phi_0^{(S^e)}(x, y, z). \quad (8.15)$$

La fonction d'onde est alors indépendante des angles d'Euler. Les états S sont toujours pairs d'après (8.11), mais nous pouvons construire les fonctions symétriques et antisymétriques avec (8.14). La fonction $\Phi_0^{(S^e)}$ est une fonction propre du hamiltonien effectif $\mathcal{H}^{(S^e)}$ pour l'onde S

$$\mathcal{H}^{(S^e)}\Phi_0^{(S^e)} = E\Phi_0^{(S^e)}. \quad (8.16)$$

Les éléments de matrice de cet hamiltonien entre deux fonctions F et G peuvent s'écrire en coordonnées périmétriques (équation (6.23)) selon

$$\langle F | \mathcal{H}^{(S^e)} | G \rangle = \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \int_0^\infty dz (\mathcal{T}(F, G) + \mathcal{V}(F, G)) \quad (8.17)$$

où les fonctions $\mathcal{T}(F, G)$ et $\mathcal{V}(F, G)$ sont données par

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(F, G) = & 2 \left\{ \left[\frac{x(y+z)(x+y+z)}{m_1} + \frac{xz(z+x)}{m_2} + \frac{xy(x+y)}{m_3} \right] \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial x} \right. \\ & + \left[\frac{yz(y+z)}{m_1} + \frac{y(z+x)(x+y+z)}{m_2} + \frac{xy(x+y)}{m_3} \right] \frac{\partial F}{\partial y} \frac{\partial G}{\partial y} \\ & + \left[\frac{yz(y+z)}{m_1} + \frac{xz(z+x)}{m_2} + \frac{z(x+y)(x+y+z)}{m_3} \right] \frac{\partial F}{\partial z} \frac{\partial G}{\partial z} \\ & - \frac{yz(y+z)}{m_1} \left(\frac{\partial F}{\partial y} \frac{\partial G}{\partial z} + \frac{\partial F}{\partial z} \frac{\partial G}{\partial y} \right) \\ & - \frac{xz(z+x)}{m_2} \left(\frac{\partial F}{\partial z} \frac{\partial G}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial z} \right) \\ & \left. - \frac{xy(x+y)}{m_3} \left(\frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial y} + \frac{\partial F}{\partial y} \frac{\partial G}{\partial x} \right) \right\}, \quad (8.18) \end{aligned}$$

$$\mathcal{V}(F, G) = (x+y)(x+z)(y+z) \left[\frac{2Z_1Z_2}{x+y} + \frac{2Z_2Z_3}{y+z} + \frac{2Z_3Z_1}{z+x} \right] F G. \quad (8.19)$$

Comme indiqué au chapitre 6, l'utilisation des coordonnées périmétriques permet l'élimination de toutes les singularités provenant de l'interaction coulombienne.

8.3.2 Etats P

Dans le cas $L = 1$, la fonction d'onde est la somme de trois termes

$$\Psi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\phi} \bar{\Phi}_{-1}^{(P)}(R, \rho, \zeta) + \cos \theta \bar{\Phi}_0^{(P)}(R, \rho, \zeta) - \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\phi} \bar{\Phi}_1^{(P)}(R, \rho, \zeta). \quad (8.20)$$

Avec les formules (8.12), nous obtenons les expressions des fonctions d'onde des états pairs

$$\Psi_{10}^e = \sin \theta \sin \phi \bar{\Phi}^{(P^e)} \quad (8.21)$$

et impairs

$$\Psi_{10}^o = \cos \theta \bar{\Phi}_0^{(P^o)} - \sin \theta \cos \phi \bar{\Phi}_1^{(P^o)} \quad (8.22)$$

où $\bar{\Phi}^{(P^e)}$, $\bar{\Phi}_0^{(P^o)}$ et $\bar{\Phi}_1^{(P^o)}$ sont des combinaisons des fonctions $\bar{\Phi}_{-1}^{(P)}$, $\bar{\Phi}_0^{(P)}$ et $\bar{\Phi}_1^{(P)}$.

Fonctions d'onde paires

Après l'élimination des angles d'Euler, l'équation de Schrödinger devient $H^{(P^e)} \bar{\Phi}^{(P^e)} = E \bar{\Phi}^{(P^e)}$, avec le hamiltonien effectif donné par (F.1). Comme cet hamiltonien contient des singularités en $1/\rho^2$ et $1/R^2$, nous introduisons un facteur de régularisation dans la fonction $\bar{\Phi}^{(P^e)}$, qui devient

$$\bar{\Phi}^{(P^e)}(R, \rho, \zeta) = \rho R \tilde{\Phi}^{(P^e)}(R, \rho, \zeta) = \sqrt{xyz(x+y+z)} \Phi^{(P^e)}(x, y, z). \quad (8.23)$$

La fonction $\Phi^{(P^e)}$ est une fonction propre du hamiltonien effectif régularisé $\mathcal{H}^{(P^e)}$

$$\mathcal{H}^{(P^e)} \Phi^{(P^e)} = E \mathcal{R}^2 \Phi^{(P^e)}, \quad (8.24)$$

où $\mathcal{R}(x, y, z)$ est le facteur de régularisation $\sqrt{xyz(x+y+z)}$. Les éléments de matrice de cet hamiltonien $\mathcal{H}^{(P^e)}$ entre deux fonctions F et G , qui sont non singulières et qui tendent vers zéro aux grandes distances, peuvent s'écrire sous la forme symétrique

$$\langle F | \mathcal{H}^{(P^e)} | G \rangle = \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \int_0^\infty dz xyz(x+y+z) (\mathcal{T}(F, G) + \mathcal{V}(F, G)) \quad (8.25)$$

avec les mêmes expressions $\mathcal{T}(F, G)$ et $\mathcal{V}(F, G)$ que pour les états S . La seule différence avec l'expression (8.17) provient du carré du facteur de régularisation \mathcal{R} .

Ce facteur définit le comportement de la fonction d'onde aux courtes distances, et est relié au comportement en R^L de la fonction d'onde correspondant à un état de moment cinétique orbital L . Dans le cas des atomes à deux électrons, ce facteur peut être obtenu en approchant la fonction d'onde paire par le couplage de fonctions d'ondes de type hydrogénoïde Ψ_l^H ,

$$\Psi_{10}^e = \left[\Psi_{l_1=1}^H(\mathbf{r}_{31}) \otimes \Psi_{l_2=1}^H(\mathbf{r}_{32}) \right]_{L=1M=0} \quad (8.26)$$

où \mathbf{r}_{3i} est la coordonnée de l'électron i relativement au noyau, et l_i est le moment cinétique orbital relatif du même électron. Les deux moments cinétiques angulaires relatifs sont couplés pour former un état de moment cinétique total L égal à 1. Ces fonctions hydrogénoïdes sont données explicitement par $\Psi_1^H(\mathbf{r}) \propto r e^{-Zr/2} Y_1^m(\Omega)$, où Z est le nombre de charge et Y_1^m est une harmonique sphérique. Ecrite en coordonnées périmétriques, la fonction d'onde approchée (8.26) est donnée par l'expression

$$\Psi_{10}^e \propto \sqrt{xyz(x+y+z)} e^{-Z \frac{2z+y+x}{4}} \sin \theta \sin \phi \quad (8.27)$$

dans laquelle nous observons l'apparition naturelle du facteur de régularisation.

Fonctions d'onde impaires

Les fonctions d'onde impaires (8.22) présentant deux dépendances différentes en les angles d'Euler, l'équation de Schrödinger peut s'écrire comme un système de deux équations agissant sur $\bar{\Phi}_0^{(P^o)}$ et $\bar{\Phi}_1^{(P^o)}$, lorsque nous avons effectué l'intégration sur les angles d'Euler (F.2). Comme dans le cas des états pairs, le hamiltonien pour $K = 1$ contient des singularités en $1/\rho^2$ et $1/R^2$ (équation (F.6)). Nous régularisons alors la fonction $\bar{\Phi}_1^{(P^o)}$ et nous exprimons les deux fonctions en coordonnées périmétriques.

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_0^{(P^o)}(R, \rho, \zeta) &= \Phi_0^{(P^o)}(x, y, z), \\ \bar{\Phi}_1^{(P^o)}(R, \rho, \zeta) &= \rho R \tilde{\Phi}_1^{(P^o)}(R, \rho, \zeta) = \sqrt{xyz(x+y+z)} \Phi_1^{(P^o)}(x, y, z). \end{aligned} \quad (8.28)$$

Avec les fonctions $\Phi_0^{(P^o)}$ et $\Phi_1^{(P^o)}$, l'équation de Schrödinger devient

$$\begin{pmatrix} \mathcal{H}_{00}^{(P^o)} & \mathcal{H}_{01}^{(P^o)} \\ \mathcal{H}_{10}^{(P^o)} & \mathcal{H}_{11}^{(P^o)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_0^{(P^o)} \\ \Phi_1^{(P^o)} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \mathcal{R}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_0^{(P^o)} \\ \Phi_1^{(P^o)} \end{pmatrix}, \quad (8.29)$$

où apparaît la matrice de norme qui dépend du facteur de régularisation \mathcal{R} . Le hamiltonien effectif $\mathcal{H}^{(P^o)}$ dans (8.29) donne lieu aux éléments de matrice suivants entre deux fonctions F et G

$$\begin{aligned} \langle F | \mathcal{H}_{00}^{(P^o)} | G \rangle &= \langle F | \mathcal{H}^{(S^e)} | G \rangle \\ &+ \frac{4}{\mu_{12}} \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \int_0^\infty dz \frac{(x+z)(y+z)}{x+y} FG, \end{aligned} \quad (8.30)$$

$$\begin{aligned} \langle F | \mathcal{H}_{01}^{(P^o)} | G \rangle &= 2 \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \int_0^\infty dz \frac{xyz(x+y+z)}{x+y} \\ &\left\{ \left[\frac{x+z}{m_2} - \frac{y+z}{m_1} \right] \left(F \frac{\partial G}{\partial z} - G \frac{\partial F}{\partial z} \right) \right. \\ &- \left[\frac{y+z}{m_1} + \frac{x+z}{m_2} \right] \left(F \frac{\partial G}{\partial x} - G \frac{\partial F}{\partial x} \right) \\ &\left. + \left[\frac{y+z}{m_1} + \frac{x+z}{m_2} \right] \left(F \frac{\partial G}{\partial y} - G \frac{\partial F}{\partial y} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$+2 \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \int_0^\infty dz \frac{(x+z)(y+z)}{x+y} \left[\frac{xz - yz - y^2 - xy}{m_1} + \frac{xz - yz + x^2 + xy}{m_2} \right] FG, \quad (8.31)$$

$$\langle F | \mathcal{H}_{10}^{(P^o)} | G \rangle = \langle G | \mathcal{H}_{01}^{(P^o)} | F \rangle, \quad (8.32)$$

$$\langle F | \mathcal{H}_{11}^{(P^o)} | G \rangle = \langle F | \mathcal{H}^{(P^e)} | G \rangle. \quad (8.33)$$

Les éléments de matrice de $\mathcal{H}_{11}^{(P^o)}$ sont identiques à ceux de $\mathcal{H}^{(P^e)}$ parce que les deux hamiltoniens correspondent à la composante $|K| = 1$ de la fonction d'onde.

8.4 Choix des réseaux et bases de Lagrange

Le choix des réseaux de Lagrange associés aux coordonnées périmétriques et la construction des fonctions de Lagrange à trois dimensions sont décrits au chapitre 6. Aux coordonnées x , y et z sont associés des réseaux de Lagrange-Laguerre de N_x , N_y et N_z points respectivement. Les facteurs d'échelle correspondant sont notés h_x , h_y et h_z , et les fonctions de Lagrange à une dimension $f_i^{N_x}(x)$, $f_j^{N_y}(y)$ et $f_k^{N_z}(z)$ sont basées sur les polynômes de Laguerre (2.109). Les fonctions de Lagrange à trois dimensions en coordonnées périmétriques $F_{ijk}(x, y, z)$ sont définies par (6.43)

$$F_{ijk}(x, y, z) = \mathcal{N}_{ijk}^{-1/2} f_i^{N_x}(x/h_x) f_j^{N_y}(y/h_y) f_k^{N_z}(z/h_z) \quad (8.34)$$

où le facteur de normalisation \mathcal{N}_{ijk} est donné par (6.44).

Les fonctions de Lagrange $F_{ijk}(x, y, z)$ vérifient les conditions de Lagrange aux points du réseau à trois dimensions (x_p, y_q, z_r)

$$F_{ijk}(h_x x_p, h_y y_q, h_z z_r) = (\mathcal{N}_{ijk} \lambda_i^x \lambda_j^y \lambda_k^z)^{-1/2} \delta_{ip} \delta_{jq} \delta_{kr}. \quad (8.35)$$

Comme indiqué au chapitre 6, avec l'élément de volume (8.8), ces fonctions ne sont pas orthogonales, mais elles sont orthonormées à l'approximation de Gauss, avec le choix (6.44) du facteur de normalisation \mathcal{N}_{ijk} .

La fonction d'onde d'un état du système à trois corps de parité π est alors développée dans la base des fonctions de Lagrange F_{ijk}

$$\Phi_K^{(L^\pi)}(x, y, z) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} C_{Kijk}^{(L^\pi)} F_{ijk}(x, y, z) \quad (8.36)$$

où les $C_{Kijk}^{(L^\pi)}$ sont des coefficients variationnels linéaires. Lorsque deux des trois particules sont identiques, il est avantageux d'introduire la symétrie de la fonction d'onde directement dans le développement (8.36). Soient 1 et 2 les deux particules identiques. D'après (6.21), nous constatons qu'une permutation des deux particules est équivalente à une permutation des coordonnées périmétriques x et y . Nous développons alors les fonctions d'onde symétriques et

antisymétriques respectivement selon

$$\Phi_K^{(L^\pi)^s}(x, y, z) = \sum_{i=1}^N \sum_{j \leq i}^N \sum_{k=1}^{N_z} C_{Kijk}^{(L^\pi)^s} (2(1 + \delta_{ij}))^{-\frac{1}{2}} [F_{ijk}(x, y, z) + F_{ijk}(y, x, z)], \quad (8.37)$$

$$\Phi_K^{(L^\pi)^a}(x, y, z) = \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^N \sum_{k=1}^{N_z} C_{Kijk}^{(L^\pi)^a} 2^{-1/2} [F_{ijk}(x, y, z) - F_{ijk}(y, x, z)], \quad (8.38)$$

où nous choisissons la même taille de réseau N et le même facteur d'échelle h pour les variables x et y , afin de bénéficier des conditions de Lagrange (8.35) lorsque nous utilisons l'approximation de Gauss. Lorsque nous introduisons un facteur de régularisation $\mathcal{R}(x, y, z)$ dans la fonction d'onde $\bar{\Phi}_K^{(L^\pi)}$ (équations (8.23) et (8.28)), le développement (8.36) est remplacé par

$$\Phi_K^{(L^\pi)}(x, y, z) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} C_{Kijk}^{(L^\pi)} \mathcal{R}_{ijk}^{-1} F_{ijk}(x, y, z), \quad (8.39)$$

où \mathcal{R}_{ijk} est le facteur de régularisation calculé aux points du réseau, c'est-à-dire $\mathcal{R}_{ijk} = \mathcal{R}(h_x x_i, h_y y_j, h_z z_k)$. Ce facteur doit être mis en parallèle avec la définition (2.55) des fonctions régularisées, qui vérifient les conditions de Lagrange et qui sont orthonormées à l'approximation de Gauss. La différence avec l'expression (2.55) est que le facteur de régularisation \mathcal{R} n'apparaît pas dans le développement (8.39) mais est introduit dans la définition du hamiltonien effectif (équations (8.24) et (8.29)).

Avec le développement (8.39), la matrice de norme des états P (équations (8.24) et (8.29)) devient la matrice identité lorsqu'elle est évaluée à l'aide de la règle de quadrature de Gauss. Nous réduisons ainsi la difficulté puisque le calcul ne conduit pas à un problème aux valeurs propres généralisé.

Nous examinons maintenant l'évaluation des éléments de matrice dans la base des fonctions de Lagrange (8.34). Aucune intégration numérique n'est nécessaire puisque nous utilisons la quadrature de Gauss associée au réseau. Le cas des états S a été présenté au chapitre 6 (équation (6.45)), et ces résultats peuvent facilement être étendus au cas des états P pairs. Pour les états P impairs, les éléments de matrice, calculés dans la base de Lagrange, sont présentés à l'annexe F (équations (F.7) et (F.8)).

8.5 Calcul de valeurs moyennes d'observables

Nous explicitons dans cette section les expressions de quelques valeurs moyennes d'opérateurs. Dans la méthode des réseaux de Lagrange, ces valeurs moyennes sont obtenues très simplement en utilisant la règle de quadrature de Gauss associée au réseau, et ne nécessitent donc aucun calcul analytique. Comme pour le potentiel coulombien, les éléments de matrice d'observables qui ne contiennent pas d'opérateurs différentiels valent approximativement

$$\langle F_{i'j'k'} | O(x, y, z) | F_{ijk} \rangle = \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \int_0^\infty dz (x+y)(y+z)(z+x)$$

$$\begin{aligned} & F_{i'j'k'}(x, y, z)O(x, y, z)F_{ijk}(x, y, z) \\ & \approx O(h_x x_i, h_y y_j, h_z z_k)\delta_{ii'}\delta_{jj'}\delta_{kk'} \end{aligned} \quad (8.40)$$

dans la base des fonctions de Lagrange (8.34). En particulier, l'orthonormalité de la base à l'approximation de Gauss découle de $O = 1$. L'élément de matrice de l'observable $O(x, y, z)$ avec la fonction d'onde (8.36) s'écrit alors

$$\langle \Phi_K^{(L^\pi)}(x, y, z) | O(x, y, z) | \Phi_K^{(L^\pi)}(x, y, z) \rangle \approx \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} C_{Kijk}^{(L^\pi)} O(h_x x_i, h_y y_j, h_z z_k). \quad (8.41)$$

Nous pouvons également déterminer les valeurs moyennes des fonctions de Dirac à deux ou trois corps [Pek58]. Dans le cas des états S , elles peuvent s'écrire

$$\begin{aligned} \langle \delta_{31} \rangle &= \langle \delta(\mathbf{r}_{31}) \rangle = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dy y^2 \Psi_{00}^2(0, y, 0) \\ &\approx \frac{2}{\pi} h_y^3 \sum_{q=1}^{N_y} \lambda_q^y y_q^2 \Psi_{00}^2(0, h_y y_q, 0), \end{aligned} \quad (8.42)$$

$$\begin{aligned} \langle \delta_{12} \rangle &= \langle \delta(\mathbf{r}_{12}) \rangle = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dz z^2 \Psi_{00}^2(0, 0, z) \\ &\approx \frac{2}{\pi} h_z^3 \sum_{r=1}^{N_z} \lambda_r^z z_r^2 \Psi_{00}^2(0, 0, h_z z_r), \end{aligned} \quad (8.43)$$

$$\langle \delta_{123} \rangle = \langle \delta(\mathbf{r}_{31})\delta(\mathbf{r}_{23}) \rangle = \frac{4}{\pi^2} \Psi_{00}^2(0, 0, 0) \quad (8.44)$$

où Ψ_{00} représente la fonction d'onde d'un état S .

D'autres grandeurs caractéristiques des systèmes coulombiens sont les conditions aux points de rebroussement ("cusp conditions" en anglais). Il s'agit de conditions que doit satisfaire la fonction d'onde et qui découlent de la singularité du potentiel coulombien. Pour la fonction d'onde exacte Ψ , le rapport $\frac{H\Psi}{\Psi} = E$ est constant. Etant donné les singularités du hamiltonien H lorsque l'une des distances interparticules r_{ij} ($i \neq j = 1, 2, 3$) est nulle, ceci n'est possible que si la fonction d'onde satisfait certaines conditions, c'est-à-dire si les grandeurs

$$\nu_{ij} = \left(\frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial r_{ij}} \right)_{r_{ij}=0} \quad (8.45)$$

prennent une valeur bien définie. Cette relation est équivalente à

$$\frac{\partial \Psi}{\partial r_{ij}} \Big|_{r_{ij}=0} = \nu_{ij} \Psi \Big|_{r_{ij}=0} \quad (8.46)$$

et doit être vérifiée pour toutes valeurs des distances r_{kl} avec $(k, l) \neq (i, j)$. L'expression (8.45) est généralement remplacée par la formulation globale

$$\nu_{ij} = \frac{\langle \Psi | \delta(\mathbf{r}_{ij}) \partial_{r_{ij}} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \delta(\mathbf{r}_{ij}) | \Psi \rangle} \quad (8.47)$$

qui exprime les conditions aux points de rebroussement à l'aide de valeurs moyennes dans l'état Ψ . La valeur exacte de ces conditions aux points de rebroussement ν_{ij} est une fonction des nombres de charge et des masses des particules. Elles permettent donc de tester la qualité de la fonction d'onde obtenue par calculs. Les conditions aux points de rebroussement (8.47) s'écrivent en coordonnées périmétriques pour un état S

$$\nu_{12} = \frac{\int_0^\infty dz z^2 \Psi_{00}(0, 0, z) \left[\frac{\partial \Psi_{00}}{\partial x}(0, 0, z) + \frac{\partial \Psi_{00}}{\partial y}(0, 0, z) - \frac{\partial \Psi_{00}}{\partial z}(0, 0, z) \right]}{\int_0^\infty dz z^2 \Psi_{00}^2(0, 0, z)}, \quad (8.48)$$

$$\nu_{31} = \frac{\int_0^\infty dy y^2 \Psi_{00}(0, y, 0) \left[\frac{\partial \Psi_{00}}{\partial x}(0, y, 0) - \frac{\partial \Psi_{00}}{\partial y}(0, y, 0) + \frac{\partial \Psi_{00}}{\partial z}(0, y, 0) \right]}{\int_0^\infty dy y^2 \Psi_{00}^2(0, y, 0)}. \quad (8.49)$$

Ces expressions peuvent être exprimées aux points du réseau similairement aux équations (8.42-8.44). Les valeurs ainsi calculées de ν_{12} et ν_{31} doivent être comparées aux valeurs exactes

$$\nu_{ij} = Z_i Z_j \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}. \quad (8.50)$$

Pour évaluer les valeurs moyennes des fonctions de Dirac et des conditions aux points de rebroussement, nous devons uniquement connaître la valeur des fonctions de Lagrange en zéro, et celle de leur dérivée première en zéro et aux points du réseau. Par exemple, avec le développement (8.36) et $L_N(0) = 1$, nous obtenons pour (8.44)

$$\Psi_{00}(0, 0, 0) \approx \sum_{ijk} (-1)^{i+j+k+1} (x_i y_j z_k \mathcal{N}_{ijk})^{-1/2} C_{0ijk}^{(S^e)}. \quad (8.51)$$

Un autre indicateur de la qualité de la fonction d'onde obtenue par calculs découle du théorème du viriel [CDL73]. Ce dernier permet de relier les valeurs moyennes de l'énergie cinétique T et de l'énergie potentielle V dans un état propre de l'équation de Schrödinger stationnaire. Si le potentiel V est une fonction homogène de degré n , alors

$$2\langle T \rangle = n\langle V \rangle. \quad (8.52)$$

Dans le cas du potentiel coulombien $V = V_C$, n vaut -1 , et nous définissons le coefficient du viriel η selon

$$\eta = \left| 1 + \frac{\langle V_C \rangle}{2\langle T \rangle} \right|, \quad (8.53)$$

où les valeurs moyennes des opérateurs cinétique T et de potentiel coulombien V_C sont obtenues à partir des expressions présentées aux sections précédentes. En vertu du théorème du viriel, ce coefficient est nul dans le cas de la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger. Ce facteur est ainsi une mesure de la qualité globale de la fonction d'onde obtenue par calcul, plus le facteur du viriel η est petit, meilleure est la fonction d'onde.

8.6 Applications

8.6.1 Energies d'états liés

Les énergies des états liés et les coefficients des fonctions d'onde correspondantes sont obtenus en calculant les plus petites valeurs propres de la matrice hamiltonienne approchée et les vecteurs propres associés [HB99, HB01]. Ils sont déterminés à l'aide de l'algorithme de Davidson tel que développé par Stathopoulos et Fisher [SF94].

Nous considérons tout d'abord l'atome d'hélium, identifié par la notation ${}^{\infty}\text{He}$ ou He selon la valeur infinie ou finie de la masse du noyau. Le tableau 8.2 illustre la convergence de l'énergie de quelques états de l'atome d'hélium He avec le nombre de points de réseau. La notation standard pour ces états est $(1snL)^{2S+1}L^{\pi}$, puisque un seul électron est dans un état excité, caractérisé par le nombre quantique principal n et le moment cinétique orbital relatif $l = L$. Les résultats sont donnés en unités atomiques ($\hbar = m_e = e = 1$). La masse du noyau est d'abord choisie égale à l'infini. Le nombre total N_p de points de réseau est toujours égal à

$$N_p = N_x N_y N_z. \quad (8.54)$$

Le nombre N_T de fonctions de base dépend des symétries de l'état étudié, et est donné par

$$N_T = \frac{1}{2} N_z N(N+1) \quad (8.55)$$

pour les états symétriques ${}^1S^e$ et ${}^3P^e$, et par

$$N_T = \frac{1}{2} N_z N(N-1) \quad (8.56)$$

pour les états antisymétriques ${}^3S^e$ et ${}^1P^e$, avec $N = N_x = N_y$. Pour les états P^o impairs, nous avons

$$N_T = N_z N^2. \quad (8.57)$$

Les paramètres non linéaires h et h_z sont grossièrement optimisés pour chaque état. Les valeurs de ces paramètres sont $h = 0.4$, $h_z = 0.5$ pour l'état 1^1S^e , $h = 0.8$, $h_z = 0.5$ pour l'état 2^1S^e , $h = 0.8$, $h_z = 0.5$ pour l'état 2^3S^e , $h = 0.9$, $h_z = 0.4$ pour les états ${}^1P^o$, et $h = 0.8$, $h_z = 0.4$ pour les états ${}^3P^o$. Lorsque les facteurs d'échelle ne sont pas égaux, les différents états de mêmes spin et moment cinétique angulaire ne sont pas exactement orthogonaux.

Une base de 24 600 fonctions fournit des énergies avec une erreur absolue d'environ $2 \cdot 10^{-13}$ pour l'état fondamental. Avec une base de 16 400 fonctions, la précision est d'environ $2 \cdot 10^{-12}$ pour l'état 2^1S^e . Pour l'état 2^3S^e , nous obtenons une précision sur l'énergie de 10^{-14} avec seulement 8 700 fonctions de base. Dans le cas des états P impairs, un réseau relativement petit de 13 500 points fournit déjà des précisions d'environ 10^{-12} pour les états 2^1P^o et 2^3P^o . Avec la même taille de base, les erreurs absolues sur les énergies sont d'environ 10^{-9} pour les états 3^1P^o et 3^3P^o . Il faut noter que la convergence des états P^o est antivariationnelle puisque l'énergie augmente vers la valeur correcte. Ceci provient de la nature de la méthode des réseaux de Lagrange qui est une

TAB. 8.2 – Energies de quelques états liés S^e et P^o de l'atome d'hélium, de l'ion hydrogène et du positronium dans les unités atomiques. Dans le cas de l'atome He, les facteurs d'échelle sont $h = 0.4$, $h_z = 0.5$ pour l'état 1^1S^e , $h = 0.8$, $h_z = 0.5$ pour l'état 2^1S^e , $h = 0.8$, $h_z = 0.5$ pour l'état 2^3S^e , $h = 0.9$, $h_z = 0.4$ pour les états 1^1P^o , et $h = 0.8$, $h_z = 0.4$ pour les états 3^1P^o . Pour H^- nous avons $h = 0.9$ et $h_z = 1.2$, et pour Ps^- , $h = 1.6$ et $h_z = 1.5$. Lorsqu'elles sont différentes de l'infini, les masses des noyaux sont $m_\alpha = 7\,294.261\,824\,1$, $m_p = 1\,836.152\,701$.

Etat	N	N_z	N_T	E	Référence
${}^\infty\text{He } 1^1S^e$	35	30	18 900	-2.903 724 377 034 0	-2.903 724 377 034 119 5 ^a
	40	30	24 600	-2.903 724 377 034 3	
${}^\infty\text{He } 2^1S^e$	35	20	12 600	-2.145 974 046 044	-2.145 974 046 054 419 ^a
	40	20	16 400	-2.145 974 046 052	
${}^\infty\text{He } 2^3S^e$	25	20	6 000	-2.175 229 378 236 71	-2.175 229 378 236 791 30 ^a
	30	20	8 700	-2.175 229 378 236 80	
${}^\infty\text{He } 2^1P^o$	25	15	9 375	-2.123 843 086 502	-2.123 843 086 498 093 ^a
	30	15	13 500	-2.123 843 086 500	
${}^\infty\text{He } 3^1P^o$	25	15	9 375	-2.055 146 46	-2.055 146 362 091 94 ^a
	30	15	13 500	-2.055 146 363	
${}^\infty\text{He } 2^3P^o$	25	15	9 375	-2.133 164 190 778	-2.133 164 190 779 273 ^a
	30	15	13 500	-2.133 164 190 777	
${}^\infty\text{He } 3^3P^o$	25	15	9 375	-2.058 081 24	-2.058 081 084 274 28 ^a
	30	15	13 500	-2.058 081 087	
${}^\infty\text{H}^- 1^1S^e$	35	30	18 900	-0.527 751 016 544 6	-0.527 751 016 544 30 ^b
	40	35	28 700	-0.527 751 016 544 4	
He 1^1S^e	35	30	18 900	-2.903 304 555 559 2	-2.903 304 555 559 412 ^a
	40	30	24 600	-2.903 304 555 559 7	
He 2^1S^e	35	20	12 600	-2.145 678 586 043	-2.145 678 586 053 239 ^a
	40	20	16 400	-2.145 678 586 051	
He 2^3S^e	25	20	6 000	-2.174 930 189 165 62	-2.174 930 189 165 684 ^a
	30	20	8 700	-2.174 930 189 165 70	
He 2^1P^o	25	15	9 375	-2.123 545 652 588 9	-2.123 545 652 589 685 ^a
	30	15	13 500	-2.123 545 652 589 6	
He 3^1P^o	25	15	9 375	-2.054 862 76	-2.054 862 659 681 715 ^a
	30	15	13 500	-2.054 862 660 7	
He 2^3P^o	25	15	9 375	-2.132 880 640 637	-2.132 880 640 637 299 ^a
	30	15	13 500	-2.132 880 640 640	
He 3^3P^o	25	15	9 375	-2.057 801 6	-2.057 801 491 160 876 ^a
	30	15	13 500	-2.057 801 494	
$\text{H}^- 1^1S^e$	35	30	18 900	-0.527 445 881 114 4	-0.527 445 881 114 10 ^b
	40	35	28 700	-0.527 445 881 114 2	
$\text{Ps}^- 1^1S^e$	40	30	24 600	-0.262 005 070 232 88	-0.262 005 070 232 976 ^c
	45	35	36 225	-0.262 005 070 232 96	

^aDrake [Dra96]^bFrolov [Fro98a]^cFrolov [Fro99a]

méthode variationnelle approchée. Nous rappelons que nous ne déterminons pas la convergence par le minimum de la valeur de l'énergie, mais par la stabilité des résultats par rapport à une augmentation de la taille de la base, et par de petites variations des facteurs d'échelle. Nos résultats sont en bon accord avec ceux de Drake [Dra96], qui utilise environ 1000 fonctions de base de Hylleraas, dans des ensembles "doublés" (c'est-à-dire avec deux ensembles de paramètres non linéaires). Avec cette technique, il obtient une précision meilleure que 10^{-14} sur les états S et P de l'atome He. L'objectif de Drake est d'obtenir la plus grande précision possible en minimisant au maximum le nombre de fonctions de base de son calcul variationnel. C'est pour cette raison qu'il utilise deux jeux de paramètres non linéaires, ceux-ci servant à reproduire le comportement de la fonction d'onde respectivement aux courtes et aux grandes distances. Cette technique lui permet également de tronquer de façon importante sa base. Dans nos calculs nous n'introduisons aucun raffinement de ce type car notre but est simplement d'analyser la qualité des résultats obtenus à l'aide de la méthode des réseaux de Lagrange.

Les énergies des mêmes états S et P de l'atome d'hélium correspondant à une masse du noyau égale à 7294.261 824 1 sont aussi données au tableau 8.2. Les conditions de calcul sont les mêmes que pour le cas du noyau de masse infinie. D'après le tableau 8.2, il est clair que l'introduction du terme de polarisation de masse ne réduit pas la précision des résultats, qui sont en bon accord avec les valeurs de Drake [Dra96]. Il faut noter que le traitement exact de ce terme n'introduit aucune complication dans la méthode utilisée ici.

Le tableau 8.2 contient également les résultats pour l'état fondamental de l'ion hydrogène H^- et du positronium Ps^- . Ces deux systèmes, caractérisés par une faible énergie de liaison, ne présentent pas d'états excités S ou P^o . Le seuil de dissociation de l'ion H^- dans le cas du noyau de masse infinie est déterminé par $H + e^-$, et est situé à -0.5 hartree. Celui de l'ion Ps^- est défini par $(e^+e^-) + e^-$, et est situé à -0.25 hartree. Les facteurs d'échelle valent $h = 0.3$ et $h_z = 1.2$ pour H^- , et $h = 1.6$ et $h_z = 1.5$ pour Ps^- . Dans le cas de H^- , nous obtenons une précision de l'ordre de 10^{-13} sur l'énergie en utilisant 28 700 fonctions de base, à la fois avec une masse du noyau infinie, ou égale à 1836.152 701. Ces résultats sont en bon accord avec les valeurs de Frolov [Fro98a], obtenues avec 800 exponentielles dépendant des distances interparticules avec des choix en partie optimisés et en partie aléatoires des paramètres non linéaires. Pour l'ion positronium Ps^- , nous obtenons une erreur absolue sur l'énergie d'environ 10^{-14} avec une base de Lagrange de 36 225 fonctions. Ce résultat est en bon accord avec la valeur de Frolov [Fro99a], obtenue par la même technique que pour H^- . La mise en parallèle avec les résultats du tableau 8.1 illustre bien la lente convergence des résultats liée à la faible énergie de liaison de l'ion Ps^- . La réduction de l'erreur sur l'énergie de 10^{-9} à 10^{-14} nécessite en effet une très forte augmentation du nombre N_T de fonctions de base du calcul sur réseaux de Lagrange.

Au tableau 8.3 sont présentés les résultats pour les états P^e de l'atome d'hélium et de l'ion hydrogène. Ces états correspondent à une double excitation du système, les deux électrons se trouvant dans un état excité. La notation atomique habituelle est $(2pnp)^{2S+1}P^e$. Dans le cas de l'atome d'hélium, tous

ces états sont liés avec notre hamiltonien (8.1). En effet, du fait de la symétrie de ces états, le seuil d'ionisation vers $\text{He}^{++} + e^-$ est donné par l'énergie $2p$ de l'ion He^+ à -0.5 . En réalité, ces états P^e se dissocient spontanément à cause de l'existence de petits termes de spin négligé dans l'équation (8.1). Ici nous ne considérons que les états $(2p^2)^3P^e$ et $(2p3p)^1P^e$ de l'atome d'hélium, dénotés 2^3P^e et 3^1P^e . Pour l'ion hydrogène H^- , le seuil d'ionisation est à -0.125 . Contrairement à l'atome d'hélium, l'ion H^- ne présente qu'un seul état sous ce seuil. La notation complète pour cet état est $(2p^2)^3P^e$, et nous le dénotons 2^3P^e . Les facteurs d'échelle sont $h = 1.0, h_z = 0.6$ pour l'état 2^3P^e de He, $h =$

TAB. 8.3 – Energies de quelques états P^e de l'atome d'hélium et de l'ion hydrogène dans les unités atomiques. Les facteurs d'échelle sont $h = 1.0, h_z = 0.6$ pour l'état 2^3P^e de He, $h = 1.8, h_z = 0.8$ pour l'état 3^1P^e de He, et $h = 0.8, h_z = 1.0$ pour H^- . Lorsqu'elles sont différentes de l'infini, les masses des noyaux sont $m_\alpha = 7294.2618241$ et $m_p = 1836.1515$.

Etat	N	N_z	N_T	E	Référence
${}^\infty\text{He } 2^3P^e$	30	20	9300	-0.71050015567823	-0.71500155678334 ^a
	35	20	12600	-0.71050015567833	
${}^\infty\text{He } 3^1P^e$	30	20	8700	-0.580246472594381	-0.58024647259439 ^a
	35	20	11900	-0.580246472594388	
${}^\infty\text{H}^- 2^3P^e$	50	15	19125	-0.1253487	-0.12535488824 ^b
	55	15	23100	-0.1253513	
He 2^3P^e	30	20	9300	-0.71039645702184	-0.7103965 ^c
	35	20	12600	-0.71039645702181	
He 3^1P^e	30	20	8700	-0.58016576830840	
	35	20	11900	-0.58016576830839	
$\text{H}^- 2^3P^e$	50	15	19125	-0.1252763	-0.1252823919 ^c
	55	15	23100	-0.1252790	

^aGoodson *et coll.* [GWLH91]

^bBylicki et Nicolaidis [BN00]

^cBhatia [Bha70]

$1.8, h_z = 0.8$ pour l'état 3^1P^e de He, et $h = 0.8, h_z = 1.0$ pour l'état 2^3P^e de H^- . Pour l'hélium, les états P^e sont déterminés en prenant la masse du noyau égale à l'infini ou à 7294.2618241 . A nouveau les résultats montrent que le terme de polarisation de masse peut être traité exactement dans le hamiltonien sans perte de précision. Nous obtenons, avec les deux choix de masse du noyau, une erreur absolue sur les valeurs des énergies d'environ $5 \cdot 10^{-14}$, avec environ 12000 fonctions de base. Nos valeurs sont en très bon accord avec Goodson *et coll.* [GWLH91] pour le cas du noyau de masse infinie, et avec Bhatia [Bha70] lorsque la masse du noyau vaut 7294.2618241 . Goodson *et coll.* utilisent les dégénérescences interdimensionnelles pour déterminer les énergies des états doublement excités P^e de l'atome d'hélium à partir de calculs d'énergies d'états excités S^e . Cette technique est basée sur l'équivalence entre les énergies d'états de moment cinétique orbital L de l'équation de Schrödinger à trois dimensions et les énergies d'états S de l'équation de Schrödinger à plus de trois dimensions.

Ils obtiennent ainsi des énergies avec une erreur absolue allant de $3 \cdot 10^{-15}$ pour l'état 2^3P^e à 10^{-12} pour l'état 3^1P^e . Bhatia utilise 100 fonctions de type Hylleraas, et introduit le terme de polarisation de masse comme une perturbation de l'énergie 3^3P^e obtenue avec un noyau de masse infinie. Il obtient ainsi une précision sur l'énergie de l'ordre de 10^{-7} . Le même ordre de précision ne requiert également qu'une centaine de fonctions de Lagrange en coordonnées périmétriques.

Les résultats pour l'ion hydrogène sont moins satisfaisants. L'état 2^3P^e de H^- a une très faible énergie de liaison et la fonction d'onde correspondante décroît lentement aux grandes distances. Comme toutes nos fonctions de base F_{ijk} [équations (2.109) et (8.34)] présentent la même décroissance exponentielle aux grandes distances, elles ne sont pas bien adaptées pour reproduire le comportement asymptotique de cette fonction d'onde faiblement liée. Ceci induit une lente convergence de nos calculs. Lorsqu'elle n'est pas infinie, la masse du proton est choisie égale à 1836.151 5 comme dans [Bha70]. Avec 23 100 fonctions de base, nous obtenons des énergies avec une erreur absolue de quelques 10^{-6} , qui sont moins bonnes que les valeurs de Bhatia [Bha70] pour la masse finie du proton, et que Bylicki et Nicolaidis [BN00] pour la masse infinie du proton. Ces auteurs obtiennent une précision de 10^{-12} avec environ 3000 fonctions.

Le tableau 8.4 reprend les résultats pour l'ion moléculaire H_2^+ . Le rap-

TAB. 8.4 – Energies de l'état fondamental (0,0), du premier état excité de vibration (1,0), du premier état excité de rotation (0,1), de ce même état $(0,1)^{K=0}$ calculée par une approximation dans laquelle seule la composante $K = 0$ de la fonction d'onde est considérée, et de l'état doublement excité (1,1) de l'ion moléculaire H_2^+ . Les facteurs d'échelle sont $h = 0.16$, $h_z = 1.4$ pour les états (0,0) et (1,0), et $h = 0.11$, $h_z = 0.8$ pour les états (0,1), $(0,1)^{K=0}$ et (1,1).

Etat	N	N_z	N_T	E	Moss [Mos99]
(0,0)	35	25	15 750	-0.597 139 063 07	-0.597 139 063 123 4
	40	25	20 500	-0.597 139 063 121	
(1,0)	35	25	15 750	-0.587 155 677 6	-0.587 155 679 212 7
	40	25	20 500	-0.587 155 679 14	
(0,1)	35	20	24 500	-0.596 873 738 82	-0.596 873 738 832 8
	40	20	32 000	-0.596 873 738 832 7	
$(0,1)^{K=0}$	35	20	12 600	-0.596 873 727 754 6	
	40	20	16 400	-0.596 873 727 754 7	
(1,1)	35	20	24 500	-0.586 904 321 034 9	-0.586 904 321 039 4
	40	20	32 000	-0.586 904 321 039 7	

port de masse est choisi identique à celui de Moss [Mos99], c'est-à-dire $m_p = 1836.152 701$. L'état fondamental est représenté par (0,0), le premier état excité de vibration par (1,0), et le premier état excité de rotation par (0,1). Le nombre total de fonctions de base N_T est donné par (8.55) pour les états (0,0) et (1,0), et par (8.57) pour les états (0,1) et (1,1). Ces quatre états (0,0), (1,0),

(0,1) et (1,1) correspondraient aux états atomiques 1^1S^e , 2^1S^e , 2^3P^o et 3^3P^o . Les facteurs d'échelle sont $h = 0.16$, $h_z = 1.4$ pour les états (0,0) et (1,0), et $h = 0.11$, $h_z = 0.8$ pour les états (0,1), $(0,1)^{K=0}$ et (1,1). La notation $(0,1)^{K=0}$ correspond à l'état (0,1) calculé par une approximation $K = 0$ obtenue en prenant la fonction $\Phi_1^{(P^o)}$ de (8.28) égale à zéro.

Une base de 20 500 fonctions fournit des précisions sur les énergies d'environ $2 \cdot 10^{-12}$ pour l'état (0,0), et $7 \cdot 10^{-11}$ pour l'état (1,0). Dans le cas des états (0,1) et (1,1), avec une base de 32 000 fonctions, les énergies sont obtenues avec une erreur absolue d'environ 10^{-13} . L'approximation de Born-Oppenheimer de cette énergie peut être calculée avec le rayon moyen entre les protons dans l'état fondamental (voir tableau 8.6), et est égale à -0.59688 . L'erreur introduite par cette approximation est donc d'environ 10^{-5} . Si nous considérons maintenant l'approximation $K = 0$, définie au paragraphe précédent, pour l'énergie de l'état (0,1), nous obtenons une valeur convergée pour cette énergie (voir $(0,1)^{K=0}$ dans le tableau 8.4) qui diffère de la valeur exacte d'environ 10^{-8} , avec 16 400 fonctions de base. Ce résultat indique que le premier terme de la fonction d'onde avec une dépendance en $\cos\theta$ [équation (8.22)] est dominant. La seconde partie, avec une dépendance en $\sin\theta \cos\phi$, ne contribue que faiblement à l'énergie de l'état (0,1). Pour ces quatre états de H_2^+ , nous sommes en accord avec les valeurs de Moss [Mos99], obtenues avec une précision de 10^{-13} , en utilisant une base vibrationnelle de Fues, dont la taille n'est pas donnée. Cette base est formée de fonctions qui sont le produit de fonctions électroniques et de fonctions vibrationnelles qui sont les fonctions propres de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Fues (également appelé potentiel de Kratzer) [Flü71].

Les énergies correspondant aux deux premiers états S et P de la molécule $dt\mu$ sont donnés dans les unités atomiques au tableau 8.5. Les masses des trois

TAB. 8.5 – Energies de quelques états de la molécule $dt\mu$. Les facteurs d'échelle sont $h_x = h_y = 0.7$, $h_z = 0.6$ pour les états S (0,0) et (1,0), $h_x = h_y = 0.55$, $h_z = 0.8$ pour l'état $2P^o$ (0,1), et $h_x = h_y = 1.4$, $h_z = 0.8$ pour l'état $3P^o$ (1,1).

Etat	N_x	N_y	N_z	N_T	E	[AM88]
(0,0)	15	15	15	3 375	-111.364 511 513 1	-111.364 511 514
	20	20	20	8 000	-111.364 511 513 92	
(1,0)	15	15	15	3 375	-100.916 562	-100.916 572 09
	20	20	20	8 000	-100.916 572 05	
(0,1)	10	10	10	2 000	-108.179 543 781	-108.179 542 472
	15	15	15	6 750	-108.179 542 49	
(1,1)	25	25	20	25 000	-99.660 676	-99.660 699 257 4
	30	30	20	36 000	-99.660 694	

particules sont $m_d = 5496.918$, $m_t = 3670.481$ et $m_\mu = 206.7686$, comme dans [AM88]. Les particules 1, 2 et 3 sont respectivement le deuton, le triton et le

muon. Dans ce cas le nombre total de fonctions de base est donné par

$$N_T = (L + 1)N_x N_y N_z. \quad (8.58)$$

Les facteurs d'échelle sont $h_x = h_y = 0.7, h_z = 0.6$ pour les états (0,0) et (1,0), $h_x = h_y = 0.55, h_z = 0.8$ pour l'état (0,1), et $h_x = h_y = 1.4, h_z = 0.8$ pour l'état (1,1). Avec un réseau de 8000 points, les précisions sur ces valeurs sont d'environ $4 \cdot 10^{-10}$ pour l'état fondamental, et $4 \cdot 10^{-8}$ pour le premier état excité S . Ces valeurs sont en bon accord avec les résultats d'Alexander et Monkhorst [AM88], obtenus avec 1400 fonctions de base de Hylleraas. L'énergie du premier état P^o est obtenue avec une précision d'environ $3 \cdot 10^{-8}$, avec seulement 6750 fonctions de base. Le premier état P^o excité de la molécule $d\mu$ a une très petite énergie de liaison d'environ 0.0243 (0.66 eV), ce qui induit une convergence lente de nos calculs (Le seuil $t\mu+d$ est situé à $-99.636\,438\,58$). Avec 36 000 fonctions de base, l'erreur absolue sur cette énergie est d'environ $5 \cdot 10^{-6}$.

8.6.2 Valeurs moyennes d'observables

Afin d'examiner plus en détails la précision de la méthode, nous effectuons les calculs de différentes valeurs moyennes dans l'état fondamental de ${}^\infty\text{He}$ et H_2^+ . Pour cela nous choisissons des réseaux de tailles $N = 50$ et $N_z = 40$. Les résultats sont présentés au tableau 8.6. Ces différentes valeurs moyennes sont calculées à l'approximation de Gauss avec l'équation (8.41) pour $\langle r_{12}^n \rangle$ et $\langle r_{31}^n \rangle$, et avec les équations (8.42) à (8.53) pour les autres grandeurs. Il faut noter que les intégrants dans les calculs de $\langle r_{12}^{-2} \rangle$ et $\langle r_{31}^{-2} \rangle$ contiennent des singularités, pour lesquelles l'approximation de Gauss n'est pas précise. Par conséquent, ces valeurs moyennes ne sont pas déterminées très précisément au tableau 8.6. Puisque les fonctions d'onde sont disponibles analytiquement, ces éléments de matrice pourraient être calculés plus précisément avec d'autres méthodes, mais nous ne les considérons pas ici. La précision de l'approximation de Gauss devrait être bonne dans tous les autres cas. Les erreurs sur les résultats, estimées en faisant varier légèrement les facteurs h et h_z et par un calcul avec $N = 48$ et $N_z = 38$, sont de quelques unités sur la dernière décimale indiquée.

Nos résultats sur l'atome d'hélium avec un noyau de masse infinie peuvent être comparés avec les résultats de Frolov [Fro98b]. L'accord pour les différentes valeurs moyennes est excellent avec une précision relative décroissant d'environ 10^{-12} pour $\langle r_{12}^{-1} \rangle$ et $\langle r_{31}^{-1} \rangle$ à environ 10^{-10} pour $\langle r_{12}^4 \rangle$ et $\langle r_{31}^4 \rangle$. Dans la plupart des cas, toutes les décimales sont en accord, excepté la dernière. La comparaison des coefficients aux points de rebroussement ν_{12} et ν_{31} est assez étonnante : ν_{12} est meilleur dans le calcul de Frolov, tandis que ν_{31} est meilleur dans le nôtre. Le paramètre η est clairement meilleur chez Frolov [Fro98b]. Notre fonction d'onde est probablement moins bonne.

Au tableau 8.6, nous présentons également les valeurs moyennes obtenues dans l'état fondamental de l'ion moléculaire H_2^+ . Moss [Mos99] ne fournissant pas de valeurs moyennes, elles sont comparées avec les résultats de Frolov [Fro99b] dont l'énergie est moins précise mais dont la valeur de η est meilleure. Les conditions aux points de rebroussement sont comparables, avec un ν_{12} peu précis. Les valeurs moyennes de r_{12}^n et r_{31}^n ont une précision relative d'environ

TAB. 8.6 – Propriétés de l'atome d'hélium avec un noyau de masse infinie et de l'ion moléculaire d'hydrogène : comparaison entre les calculs sur réseaux de Lagrange avec $N = 50$ et $N_z = 40$ et des résultats publiés. Les facteurs d'échelle sont $h = 0.3$ et $h_z = 0.4$ pour He et $h = 0.16$ et $h_z = 1.4$ pour H_2^+ .

	${}^\infty\text{He}$		H_2^+	
	Réseaux	Frolov [Fro98b]	Réseaux	Frolov [Fro99b]
E	-2.903 724 377 034 14	-2.903 724 377 034 09	-0.597 139 063 123 4	-0.597 139 063 107 6
$\langle r_{12}^{-2} \rangle$	1.461	1.467 709 234 9	0.243 923 46	0.243 923 499
$\langle r_{31}^{-2} \rangle$	5.94	6.017 408 866 2	1.40	1.425 744 87
$\langle r_{12}^{-1} \rangle$	0.945 818 448 799 6	0.945 818 448 800	0.490 707 76	0.490 707 798 5
$\langle r_{31}^{-1} \rangle$	1.688 316 800 711	1.688 316 800 717	0.842 492 92	0.842 492 962 3
$\langle r_{12} \rangle$	1.422 070 255 566	1.422 070 255 566	2.063 914 05	2.063 913 868
$\langle r_{31} \rangle$	0.929 472 294 874	0.929 472 294 874	1.692 966 30	1.692 966 209
$\langle r_{12}^2 \rangle$	2.516 439 312 831	2.516 439 312 836	4.313 286 7	4.313 285 946
$\langle r_{31}^2 \rangle$	1.193 482 995 018	1.193 482 995 021	3.558 798 3	3.558 797 931
$\langle r_{12}^3 \rangle$	5.308 009 640 79	5.308 009 640 84	9.125 660 0	9.125 657 56
$\langle r_{31}^3 \rangle$	1.967 948 106 674	1.967 948 106 70	8.709 883 1	8.709 881 59
$\langle r_{12}^4 \rangle$	12.981 271 358 6	12.981 271 359	19.542 356	19.542 349 4
$\langle r_{31}^4 \rangle$	3.973 564 931 63	3.973 564 931 9	24.034 841	24.034 835 3
$\langle \delta_{31} \rangle$	1.810 429 3	1.810 429 29	0.206 736 462	0.206 736 288
$\langle \delta_{12} \rangle$	0.106 345 36	0.106 345 374	$< 8 \cdot 10^{-14}$	$6.241 \cdot 10^{-10}$
$\langle \delta_{123} \rangle$	1.868 4	1.868 599	$< 7 \cdot 10^{-12}$	$1.169 \cdot 10^{-9}$
ν_{12} exact	0.5	0.5	918.076 350 50	918.076 350 50
ν_{12}	0.500 004	0.499 999 799 897	-304	-108.727 0
ν_{31} exact	-2	-2	-0.999 455 679	-0.999 455 679 4
ν_{31}	-2.000 001	-1.999 998 754 93	-0.999 455 8	-0.999 449 164 8
η	$3.64 \cdot 10^{-12}$	$2.668 \cdot 10^{-14}$	$1.5 \cdot 10^{-9}$	$9.614 \cdot 10^{-11}$

10^{-8} pour $n = -1$ à 10^{-6} pour $n = 4$. Pour les autres observables, notre accord avec Frolov [Fro99b] est assez bon. Les valeurs de $\langle \delta_{12} \rangle$ et $\langle \delta_{123} \rangle$ sont assez étonnantes car chaque amélioration dans nos calculs réduit leur ordre de grandeur. Les nombres donnés au tableau 8.6 doivent donc être considérés comme des limites supérieures.

Nous examinons maintenant les rayons en moyenne quadratique obtenus dans quelques états S et P des systèmes He, H_2^+ et $\text{dt}\mu$. Les distances interparticules et le rayon de masse de quelques états S et P sont indiqués au tableau 8.7 pour l'atome d'hélium, au tableau 8.8 pour l'ion moléculaire H_2^+ et au tableau 8.9 pour la molécule $\text{dt}\mu$. Pour déterminer ces rayons, nous utilisons

TAB. 8.7 – Distances interparticules en moyenne quadratique et rayon de masse de quelques états S et P^o de l'atome d'hélium He.

Etat	N	N_z	Distance	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$ $m_\alpha = \infty$	[SUV98]	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$ $m_\alpha = 7294.2618241$
1^1S^e	40	30	$e^- \alpha$	1.092 466 47	1.092 47	1.092 627 52
	40	30	$e^- e^-$	1.586 328 88	1.586 33	1.586 525 09
	40	30	R_M	0.891 995 14	0.891 879	0.892 011 00
2^1S^e	40	30	$e^- \alpha$	4.011 138 64		4.011 722 0
	40	30	$e^- e^-$	5.683 518 31		5.684 329 1
	40	30	R_M	3.275 080 99		3.275 110 2
2^3S^e	30	20	$e^- \alpha$	3.385 900	3.385 88	3.386 383
	30	20	$e^- e^-$	4.800 646	4.800 62	4.801 308
	30	20	R_M	2.764 576	2.764 18	2.764 593
2^1P^o	30	15	$e^- \alpha$	3.970 60	3.970 45	3.971 386
	30	15	$e^- e^-$	5.621 26	5.621 05	5.622 354
	30	15	R_M	3.241 98	3.241 42	3.242 624
3^1P^o	30	15	$e^- \alpha$	9.585 04		9.586 7
	30	15	$e^- e^-$	13.556 80		13.559 2
	30	15	R_M	7.826 16		7.827 5
2^3P^o	30	15	$e^- \alpha$	3.634 796	3.634 61	3.635 012 6
	30	15	$e^- e^-$	5.161 666	5.161 40	5.161 961 6
	30	15	R_M	2.967 798	2.967 24	2.967 975 4
3^3P^o	30	15	$e^- \alpha$	9.061 5		9.062 3
	30	15	$e^- e^-$	12.818 1		12.819 3
	30	15	R_M	7.398 7		7.399 3

les fonctions d'onde obtenues par les calculs variationnels et correspondant aux énergies données aux tableaux 8.2, 8.4 et 8.5. Ces valeurs moyennes sont calculées facilement à l'aide de l'approximation de Gauss, et ne nécessitent que l'évaluation de la distance correspondante aux points du réseau [HB99, HB01].

Dans le cas de l'atome d'hélium, nous obtenons des valeurs précises pour les rayons de différents états. Lorsque la masse du noyau est infinie, nous pouvons comparer nos résultats pour les premiers états de chaque symétrie (avec les mêmes spin et moment cinétique orbital) avec les valeurs de Suzuki *et coll.*

[SUV98]. L'accord est bon pour les distances e^-p et e^-e^- des états S , mais par contre nous sommes en léger désaccord pour les valeurs du rayon de masse. Suzuki *et coll.* semblent avoir calculé le rayon de masse en prenant la masse du noyau égale à 7294.261 824 1. En fait, dans le cas du noyau de masse infinie, le rayon de masse devient proportionnel à la distance quadratique moyenne entre l'électron et le noyau, avec un facteur $\sqrt{2/3}$. Dans le cas des états P^o , il existe quelques écarts sur les valeurs des rayons. Cependant, comme nos énergies variationnelles pour ces états sont meilleures que celles de Suzuki *et coll.*, nous supposons que nos rayons sont plus précis. L'analyse de la stabilité de nos valeurs par rapport à la taille de la base confirme que l'erreur sur ces résultats est de quelques unités sur la dernière décimale.

Les distances électron-proton, proton-proton et les rayons de masse des quatre états (0,0), (1,0), (0,1) et (1,1) de l'ion moléculaire H_2^+ sont présentés au tableau 8.8. La précision sur ces valeurs est très bonne dans tous les cas,

TAB. 8.8 – Distances interparticules en moyenne quadratique et rayon de masse de quelques états de l'ion moléculaire H_2^+ .

Etat	N	N_z	Distance	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$	Frolov [Fro99b]
(0,0)	40	25	e^-p	1.886 477 651 8	1.886 477 651 87
	40	25	pp	2.076 845 190	2.076 845 190 6
	40	25	R_M	1.243 083 455	
(1,0)	40	25	e^-p	1.978 911 8	
	40	25	pp	2.235 907 8	
	40	25	R_M	1.312 054 6	
(0,1)	40	20	e^-p	1.888 093 36	
	40	20	pp	2.079 552 37	
	40	20	R_M	1.244 277 47	
(1,1)	40	20	e^-p	1.980 618 457	
	40	20	pp	2.238 732 751	
	40	20	R_M	1.313 313 555	

puisque'elle est meilleure que 10^{-7} . Les distances e^-p et pp dans l'état fondamental sont en bon accord avec Frolov [Fro99b]. Frolov utilise des combinaisons linéaires de 500 exponentielles dépendant des coordonnées r_{ij} , avec des choix en partie optimisés et en partie aléatoires des paramètres non linéaires.

Dans le cas de la molécule $dt\mu$, nous obtenons des valeurs précises pour les différentes distances interparticules. Comme Suzuki *et coll.* ont calculé ces distances pour les états (0,0) et (0,1), nous pouvons faire la comparaison. Nous sommes en bon accord pour tous les rayons, nos valeurs étant plus précises. Nous donnons également les résultats pour l'état (1,0), pour lequel Suzuki *et coll.* n'ont fait aucun calcul. Les erreurs sur les valeurs des rayons pour cet état ne sont pas aussi petites que pour les autres états, mais ces valeurs sont néanmoins précises.

TAB. 8.9 – Distances interparticules en moyenne quadratique et rayon de masse de quelques états de la molécule $dt\mu$.

Etat	$N_x = N_y = N_z$	Distance	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$	[SUV98]
(0,0)	20	$d\mu$	0.011 729 316 1	0.011 73
	20	$t\mu$	0.011 235 542 1	0.011 24
	20	dt	0.013 922 678 2	0.013 92
	20	R_M	0.007 773 786 08	0.007 774
(1,0)	20	$d\mu$	0.022 88	
	20	$t\mu$	0.016 585	
	20	dt	0.026 76	
	20	R_M	0.013 74	
(0,1)	15	$d\mu$	0.012 681 0	0.012 68
	15	$t\mu$	0.012 031 7	0.012 03
	15	dt	0.015 307 9	0.015 31
	15	R_M	0.008 417 5	0.008 417

8.7 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons appliqué la méthode des réseaux de Lagrange à l'étude de systèmes atomiques et moléculaires à trois corps, en utilisant les coordonnées périmétriques, dont l'élément de volume régularise naturellement les singularités du potentiel coulombien. Nous avons en particulier étudié les états S et P de l'atome d'hélium He, des ions hydrogène H^- et positronium Ps^- , de l'ion moléculaire d'hydrogène H_2^+ et de la molécule $dt\mu$.

Hormis pour les états faiblement liés, la méthode des réseaux de Lagrange fournit des valeurs très précises pour les énergies des états S et P de ces systèmes, ceci étant confirmé par une comparaison avec des résultats publiés. Les piètres résultats obtenus pour les états peu liés tels que l'état $^3P^e$ de l'ion hydrogène et l'état doublement excité (1,1) de la molécule $dt\mu$ sont dus au manque de flexibilité de nos fonctions de base de Lagrange. En effet, elles ont toutes le même comportement asymptotique, c'est-à-dire qu'elles présentent la même décroissance exponentielle. Elles ne sont donc pas bien adaptées pour reproduire les fonctions d'onde d'états peu liés, et la convergence est lente dans ces cas. Ces résultats pourraient être améliorés en construisant de nouveaux réseaux de Lagrange spécifiquement pour ce problème.

Comme indiqué par ailleurs, un des avantages de la méthode des réseaux de Lagrange est la simplicité de calcul de la matrice hamiltonienne, quel que soit le potentiel. Même si les expressions des termes cinétiques, (F.7) par exemple, semblent compliquées, ces termes ne nécessitent que les valeurs des fonctions de Lagrange et de leurs dérivées aux points du réseau, et les éléments de matrice peuvent donc être évalués assez simplement. Dans l'étude de systèmes à trois corps en physique atomique et moléculaire, la plupart des méthodes ont en commun la difficulté liée à la détermination d'un hamiltonien effectif. Elles diffèrent uniquement par la méthode de résolution du problème avec

cet hamiltonien effectif. Comparativement à d'autres méthodes, la méthode des réseaux de Lagrange se révèle très simple, puisqu'aucun calcul analytique d'éléments de matrice de potentiel n'est requis. De plus, dans le cas de systèmes atomiques, le terme de polarisation de masse peut être traité exactement sans difficulté supplémentaire et sans perte de précision. Un léger inconvénient est la grande taille de la base et de la matrice hamiltonienne creuse, ce qui peut nécessiter des techniques spécifiques pour son stockage et sa manipulation. Bien que les tailles de base de Lagrange soient en général plus grandes que dans les autres méthodes, la méthode des réseaux de Lagrange a l'avantage de contenir peu de paramètres non linéaires, dont la détermination ne requiert pas de procédure complexe.

Les valeurs moyennes de différentes observables peuvent être obtenues facilement à l'aide de l'approximation de Gauss. Dans les cas de l'état fondamental de l'atome d'hélium et de l'ion moléculaire H_2^+ , la qualité de ces valeurs est excellente pour He, et raisonnable pour H_2^+ . En général, il semble que nos fonctions d'onde sont particulièrement bonnes aux courtes distances, mais que leur propriétés globales (mesurées par le facteur du viriel η) sont moins bonnes que les meilleurs calculs publiés. Ceci est relié au manque de flexibilité de nos fonctions de base de Lagrange, comme expliqué plus haut. Néanmoins nous obtenons des valeurs précises pour les rayons en moyenne quadratique et les rayons de masse de différents états S et P de plusieurs systèmes atomiques et moléculaires.

Chapitre 9

Conclusions

Dans ce travail, nous avons présenté la méthode des réseaux de Lagrange et nous l'avons mise en œuvre dans différents problèmes à deux et trois corps en mécanique quantique. Cette méthode est basée sur l'existence d'un ensemble de fonctions, dites de Lagrange, indéfiniment dérivables et qui s'annulent en tous les points d'un réseau sauf un. Ces derniers interviennent dans la définition d'une règle de quadrature de Gauss. Cette méthode est une méthode variationnelle approchée qui se situe à l'intersection des méthodes de Galerkin et de collocation, et qui allie simplicité et précision. Sa simplicité découle de l'association de la base des fonctions de Lagrange et de l'approximation de Gauss dans les calculs d'éléments de matrice. Les termes potentiels prennent dans cette base la forme typique des équations sur réseau, c'est-à-dire que la matrice potentielle est diagonale et ne dépend que des valeurs des potentiels aux points du réseau. Néanmoins, contrairement aux méthodes sur réseau traditionnelles telles que la méthode des différences finies, une expression analytique est obtenue pour la solution, et celle-ci peut donc être évaluée en tout point du domaine. Sa très bonne précision semble due quant à elle à son origine variationnelle. La méthode des réseaux de Lagrange peut être reliée à d'autres méthodes sur réseau, telles que les méthodes DVR ou du réseau de Fourier, qui sont fort utilisées en physique atomique et moléculaire. En particulier, elle représente une sous-classe des méthodes DVR pour laquelle la précision est améliorée.

Dans les problèmes d'états liés et libres de systèmes à deux corps, la méthode des réseaux de Lagrange se révèle quasiment aussi précise qu'un calcul variationnel avec une base équivalente à celle des fonctions de Lagrange. Cependant, le principe variationnel n'y est plus valable à cause de l'emploi de l'approximation de Gauss. Néanmoins, dans le cas des états liés, la propriété selon laquelle l'erreur sur l'énergie évolue comme le carré de l'erreur sur la fonction d'onde est encore vérifiée avec une bonne approximation. Que ce soit pour les problèmes d'états liés ou libres, le gain en nombre de points de la méthode des réseaux de Lagrange par rapport à un calcul par différences finies augmente rapidement avec la précision recherchée. Dans le cas de la collision nucléon-nucléon, seulement quelques dizaines de points de réseau sont requis pour obtenir une précision suffisante pour les applications en physique nucléaire. Il serait intéressant de compléter l'étude des systèmes à deux corps en

considérant le problème des états de résonance. Il s'agit d'états métastables pouvant être formés par les deux corps entrant en collision. Ces états de résonance sont caractérisés par leur énergie et leur largeur, et pourraient par exemple être étudiés en couplant la méthode des réseaux de Lagrange et la méthode de la rotation complexe [YBL78, Ho83, Bar95].

Dans le cas des systèmes à trois corps, le choix du système de coordonnées pour un traitement sur réseaux de Lagrange dépend du type d'interactions utilisées. Lorsque les trois potentiels d'interaction sont parfaitement réguliers, le système de coordonnées de Jacobi constitue le meilleur choix en termes de convergence et de remplissage de la matrice hamiltonienne. Si un seul des potentiels présente une singularité à l'origine, alors l'utilisation du système de coordonnées relatives est préférable afin de préserver la précision de la méthode. Cependant lorsque les singularités à l'origine apparaissant dans les potentiels sont toutes du type du potentiel coulombien, les coordonnées les mieux adaptées à un traitement sur réseaux de Lagrange sont les coordonnées périmétriques.

Dans les problèmes à trois corps en physique nucléaire les interactions dépendent souvent du moment cinétique relatif entre particules. Ceci nous a amenés à choisir le système de coordonnées relatives pour étudier le noyau à halo de neutrons ${}^6\text{He}$ dans un modèle à trois corps. Lors de cette étude deux approches, les méthodes mixte et "tout réseau", qui diffèrent par le nombre de coordonnées couplées à des réseaux de Lagrange, ont été comparées. Bien que simplifiant au maximum le traitement des termes potentiels, l'approche "tout réseau" s'est révélée moins avantageuse que la méthode mixte, du point de vue des taux de remplissage de la matrice hamiltonienne et de convergence en fonction de la taille de la base. La méthode mixte a par ailleurs été étendue avec succès au cas d'interactions plus générales, c'est-à-dire contenant en plus du terme central des termes spin-orbite et tensoriel. Dans le cas des systèmes à deux et trois corps, des réseaux de Lagrange de petites tailles (une vingtaine de points) suffisent pour obtenir le degré de précision sur l'énergie requis en pratique en physique nucléaire. Cette propriété pourrait être particulièrement intéressante pour les problèmes à plus de trois corps, car la taille de la matrice à manipuler évolue comme une puissance de ce nombre de points, la puissance étant quant à elle fonction du nombre de degrés de liberté du problème.

Dans le cadre de la physique atomique et moléculaire, nous avons utilisé la méthode des réseaux de Lagrange pour déterminer quelques états liés S et P de différents systèmes à trois corps tels que l'atome d'hélium, les ions hydrogène et positronium, l'ion moléculaire d'hydrogène et la molécule muonique $\text{dt}\mu$. Etant donnée la présence de potentiels coulombiens, le problème est traité à l'aide des coordonnées périmétriques. Une très bonne précision est ainsi obtenue sur les énergies des états liés sauf dans le cas des états faiblement liés, à cause du manque de flexibilité des fonctions de base de Lagrange utilisées. Ces résultats pourraient être améliorés en construisant des réseaux de Lagrange spécifiques pour ce problème, en se basant par exemple sur les propriétés des fonctions d'onde des états étudiés. En plus des énergies d'états liés, quelques valeurs moyennes d'observables ont été déterminées à l'aide de l'approximation de Gauss. Leur évaluation s'effectue ainsi simplement et conduit

à des valeurs précises pour les rayons en moyenne quadratique et les rayons de masse. La généralisation de la méthode au cas des états de moment cinétique total L quelconque est théoriquement possible. Cependant une limitation pratique provient de l'augmentation rapide de la taille de la matrice à traiter en fonction de L , en raison du couplage entre les $2L + 1$ valeurs de la projection du moment cinétique. L'extension aux problèmes coulombiens à plus de trois corps, et en particulier aux systèmes atomiques et moléculaires à quatre corps, n'est pour sa part envisageable qu'à la condition de trouver un système de coordonnées adéquat. En effet, afin de ne pas perdre la précision de la méthode, il est nécessaire de régulariser les singularités à l'origine des potentiels coulombiens. Ceci nécessite de choisir un bon système de coordonnées, c'est-à-dire pour lequel une régularisation simple est possible, comme avec les coordonnées périmétriques dans le cas des systèmes à trois corps.

Les différentes applications présentées dans ce travail prouvent de manière empirique la précision de la méthode des réseaux de Lagrange. Cependant une étude théorique de la méthode est nécessaire pour expliquer cette propriété, et en particulier pour identifier les conditions requises pour en bénéficier. D'après la comparaison avec la méthode variationnelle effectuée au chapitre 4, nous estimons que la méthode des réseaux de Lagrange peut en principe être employée pour traiter simplement et précisément toute application pour laquelle la méthode variationnelle, qui repose sur l'emploi de fonctions formant une base complète tronquée et de coefficients variationnels linéaires, fournit de bons résultats. Néanmoins, en pratique il n'est pas toujours possible de construire un réseau de Lagrange dont les fonctions associées sont équivalentes aux fonctions de la base variationnelle adaptée au problème.

Annexe A

Polynômes orthogonaux et règle de quadrature de Gauss

Dans cette annexe nous rappelons quelques propriétés générales des polynômes orthogonaux. Le cas des polynômes orthogonaux classiques est ensuite développé. A titre d'exemples nous donnons les relations explicites définissant les polynômes de Legendre et de Laguerre, ainsi que certaines de leurs propriétés. La règle de quadrature de Gauss associée aux polynômes orthogonaux est ensuite définie. Sa précision est étudiée sur base de quelques théorèmes.

A.1 Polynômes orthogonaux

Dans cette section nous utilisons les notations conventionnelles pour les polynômes orthogonaux [AS65]. Considérons des polynômes $p_n(x)$, avec $n \geq 0$. Ces polynômes sont supposés orthogonaux vis-à-vis de la fonction poids $w(x)$ définie positive sur l'intervalle (a, b)

$$\int_a^b w(x)p_n(x)p_m(x)dx = h_n\delta_{nm} \quad (\text{A.1})$$

où h_n représente la norme du polynôme $p_n(x)$. La relation d'orthogonalité induit les relations suivantes

$$\int_a^b w(x)x^m p_n(x)dx = 0 \quad 0 \leq m < n ; n = 1, 2, \dots \quad (\text{A.2})$$

Ces polynômes satisfont la relation de récurrence à trois termes

$$p_{n+1}(x) = (a_n + xb_n)p_n(x) - c_n p_{n-1}(x) \quad (\text{A.3})$$

avec $p_{-1}(x) = 0$ et $p_0(x) = 1$, et où a_n , b_n et c_n peuvent encore s'écrire

$$a_n = b_n \left(\frac{k'_{n+1}}{k_{n+1}} - \frac{k'_n}{k_n} \right), \quad (\text{A.4})$$

$$b_n = \frac{k_{n+1}}{k_n}, \quad (\text{A.5})$$

$$c_n = \frac{k_{n+1}k_{n-1}h_n}{k_n^2 h_{n-1}} \quad (\text{A.6})$$

en fonction des coefficients k_n et k'_n des puissances supérieures du polynôme $p_n(x)$

$$p_n(x) = k_n x^n + k'_n x^{n-1} + \dots \quad (\text{A.7})$$

Si les coefficients c_k de la relation de récurrence (A.3) avec $k = 1, \dots, n+1$ sont tous positifs, alors les zéros x_1, \dots, x_n du polynôme $p_n(x)$ sont tous réels et distincts, et ils séparent les zéros de $p_{n+1}(x)$. De plus si la fonction poids $w(x)$ est non-négative sur (a, b) , alors les zéros de $p_n(x)$ sont tous dans (a, b) . Ces polynômes vérifient également la formule de Darboux-Christoffel [AS65]

$$\sum_{m=0}^n \frac{p_m(x)p_m(y)}{h_m} = \frac{1}{h_n} \frac{k_n}{k_{n+1}} \frac{p_{n+1}(x)p_n(y) - p_n(x)p_{n+1}(y)}{x-y}. \quad (\text{A.8})$$

A.1.1 Zéros des polynômes

La détermination des zéros x_i des polynômes p_n suit une technique standard [Gau94]. En utilisant cette fois-ci les notations de [Gau94], la relation de récurrence (A.3) se réécrit

$$\bar{p}_{k+1}(x) = (x - \alpha_k)\bar{p}_k(x) - \beta_k\bar{p}_{k-1}(x) \quad (\text{A.9})$$

pour $k \geq 0$, et avec $\bar{p}_{-1}(x) = 0$ et $\bar{p}_0(x) = 1$. Les polynômes \bar{p}_k sont reliés aux polynômes p_k de la section précédente par un facteur multiplicatif γ_k

$$\bar{p}_k(x) = \gamma_k p_k(x) \quad (\text{A.10})$$

avec $\gamma_0 = 1$. Le carré de la norme \bar{h}_k des polynômes \bar{p}_k est donc égal à

$$\bar{h}_k = \gamma_k^2 h_k. \quad (\text{A.11})$$

Les coefficients α_k , β_k et γ_k peuvent être déduits des coefficients a_k , b_k et c_k de la formule (A.3) par les relations

$$\alpha_k = -\frac{a_k}{b_k}, \quad (\text{A.12})$$

$$\beta_k = \frac{c_k}{b_{k-1}b_k}, \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} = b_k. \quad (\text{A.14})$$

Par convention, le coefficient β_0 , qui multiplie $p_{-1} = 0$ dans (A.9), est défini par

$$\beta_0 = \int_a^b w(x) dx = \bar{h}_0 = h_0. \quad (\text{A.15})$$

Les coefficients α_k et β_k sont obtenus à partir des relations d'orthogonalité (A.1)

$$\alpha_k = \frac{1}{\bar{h}_k} \int_a^b w(x) x [\bar{p}_k(x)]^2 dx, \quad (\text{A.16})$$

$$\beta_k = \frac{1}{\bar{h}_{k-1}} \int_a^b w(x) x \bar{p}_k(x) \bar{p}_{k-1}(x) dx. \quad (\text{A.17})$$

Les zéros x_i du polynôme $p_n(x)$ correspondent aux valeurs propres de la matrice symétrique tridiagonale suivante

$$J_n = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \sqrt{\beta_{N-1}} & \alpha_{N-2} & \sqrt{\beta_N} \\ 0 & & & \sqrt{\beta_N} & \alpha_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.18})$$

formée des coefficients α_k sur la diagonale et $\sqrt{\beta_k}$ hors diagonale. Les poids A_i intervenant dans la règle de quadrature de Gauss (A.45) peuvent quant à eux s'exprimer en fonction des vecteurs propres associés. Si v_k est le vecteur propre normé de J_n correspondant à la valeur propre x_k , c'est-à-dire

$$J_n v_k = x_k v_k, \quad (\text{A.19})$$

alors les poids A_k sont donnés par

$$A_k = \beta_0 v_{k,1}^2 \quad k = 1, \dots, n \quad (\text{A.20})$$

où β_0 est défini par (A.15), et $v_{k,1}$ est la première composante de v_k .

A.1.2 Polynômes orthogonaux classiques

Des polynômes orthogonaux sont qualifiés de classiques lorsque leur fonction poids $w(x)$ vérifie l'équation différentielle

$$\frac{d}{dx} [\sigma(x)w(x)] = \tau(x)w(x) \quad (\text{A.21})$$

où $\sigma(x)$ est un polynôme de degré inférieur ou égal à 2 et $\tau(x)$ est un polynôme de degré 1. Lorsque les polynômes $\sigma(x)$ et $\tau(x)$ sont de degrés quelconques, les polynômes correspondant sont appelés semiclassiques [Ron90]. Selon le domaine de définition (a, b) , nous obtenons les polynômes de Jacobi, de Laguerre ou d'Hermite. Ces polynômes satisfont les équations différentielles suivantes [NO76]

$$\sigma(x)y'' + \tau(x)y' + d_n y = 0, \quad (\text{A.22})$$

$$[\sigma(x)w(x)y']' + d_n w(x)y = 0. \quad (\text{A.23})$$

Les caractéristiques principales des polynômes de Jacobi $P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$, de Laguerre $L_n^\alpha(x)$ et d'Hermite $H_n(x)$ sont repris dans le tableau A.1.

Ces différents polynômes peuvent être déterminés soit par la formule (A.3), soit à l'aide des relations de récurrence

$$\sigma(x)p'_n(x) = a_n^{(1)}p_{n+1}(x) + (b_n^{(1)} + c_n^{(1)}x)p_n(x), \quad (\text{A.24})$$

$$p_n(x) = a_n^{(2)}p'_{n+1}(x) + (b_n^{(2)} + c_n^{(2)}x)p'_n(x). \quad (\text{A.25})$$

Les coefficients apparaissant dans ces relations sont explicités dans le tableau A.2 pour les trois familles de polynômes orthogonaux classiques. Dans la suite nous nous limiterons aux deux cas particuliers que sont les polynômes de Legendre et de Laguerre ($\alpha = 0$).

TAB. A.1 – Polynômes orthogonaux classiques

$p_n(x)$	$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ ($\alpha > -1, \beta > -1$)	$L_n^\alpha(x)$ ($\alpha > -1$)	$H_n(x)$
(a, b)	$[-1, 1]$	$[0, \infty[$	$] -\infty, \infty[$
$w(x)$	$(1-x)^\alpha(1+x)^\beta$	$x^\alpha e^{-x}$	e^{-x^2}
$\sigma(x)$	$1-x^2$	x	1
$\tau(x)$	$\beta - \alpha - (\alpha + \beta + 2)x$	$1 + \alpha - x$	$-2x$
d_n	$n(n + \alpha + \beta + 1)$	n	$2n$

TAB. A.2 – Coefficients intervenant dans les relations de récurrence

	$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$	$L_n^\alpha(x)$	$H_n(x)$
k_n	$\frac{\Gamma(2n + \alpha + \beta + 1)}{2^n n! \Gamma(n + \alpha + \beta + 1)}$	$\frac{(-1)^n}{n!}$	2^n
k'_n	$\frac{(\alpha - \beta)\Gamma(2n + \alpha + \beta)}{2^n (n-1)! \Gamma(n + \alpha + \beta + 1)}$	$(-1)^{n-1} \frac{n + \alpha}{(n-1)!}$	0
h_n	$\frac{2^{\alpha+\beta+1} \Gamma(n + \alpha + 1) \Gamma(n + \beta + 1)}{n! (2n + \alpha + \beta + 1) \Gamma(n + \alpha + \beta + 1)}$	$\frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!}$	$2^n n! \sqrt{\pi}$
a_n	$\frac{(\alpha^2 - \beta^2)(2n + \alpha + \beta + 1)}{2(n+1)(2n + \alpha + \beta)(n + \alpha + \beta + 1)}$	$\frac{2n + \alpha + 1}{n + 1}$	0
b_n	$\frac{(2n + \alpha + \beta + 1)(2n + \alpha + \beta + 2)}{2(n+1)(n + \alpha + \beta + 1)}$	$-\frac{1}{n + 1}$	2
c_n	$\frac{(n + \alpha)(n + \beta)(2n + \alpha + \beta + 2)}{(n + 1)(2n + \alpha + \beta)(n + \alpha + \beta + 1)}$	$\frac{n + \alpha}{n + 1}$	$2n$
$a_n^{(1)}$	$-\frac{2(n+1)(n + \alpha + \beta + 1)}{2n + \alpha + \beta + 2}$	$n + 1$	-1
$b_n^{(1)}$	$\frac{(\alpha - \beta)(n + \alpha + \beta + 1)}{2n + \alpha + \beta + 2}$	$-(n + \alpha + 1)$	0
$c_n^{(1)}$	$n + \alpha + \beta + 1$	1	2
$a_n^{(2)}$	$\frac{2}{2n + \alpha + \beta + 2}$	-1	$\frac{1}{2(n+1)}$
$b_n^{(2)}$	$\frac{\alpha - \beta}{(n + \alpha + \beta + 1)(2n + \alpha + \beta + 2)}$	1	0
$c_n^{(2)}$	$-\frac{1}{n + \alpha + \beta + 1}$	0	0

A.1.3 Polynômes de Legendre

Les polynômes de Legendre $P_n(x)$ sont orthogonaux par rapport au poids $w(x) = 1$ sur l'intervalle $[-1, 1]$. Ils représentent un cas particulier des polynômes de Jacobi $P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$ pour $\alpha = \beta = 0$. Ils vérifient l'équation différentielle

$$(1 - x^2)P_n''(x) - 2xP_n'(x) + n(n + 1)P_n(x) = 0, \quad (\text{A.26})$$

et peuvent être obtenus par récurrence en utilisant les relations suivantes

$$(1 - x^2)P_n'(x) = -(n + 1)[P_{n+1}(x) - xP_n(x)], \quad (\text{A.27})$$

$$(n + 1)P_{n+1}(x) - (2n + 1)xP_n(x) + nP_{n-1}(x) = 0. \quad (\text{A.28})$$

Le carré de leur norme vaut (voir le tableau A.2)

$$h_n = \frac{2}{2n + 1}, \quad (\text{A.29})$$

et les coefficients des deux plus hautes puissances dans P_n (A.7) sont

$$k_n = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}, \quad (\text{A.30})$$

$$k'_n = 0, \quad (\text{A.31})$$

car les polynômes de Legendre sont soit pairs soit impairs selon la parité de n . Enfin nous donnons quelques valeurs particulières de ces polynômes de Legendre

$$P_n(1) = 1, \quad (\text{A.32})$$

$$P_n(-1) = (-1)^n, \quad (\text{A.33})$$

$$P_{2n+1}(0) = 0, \quad (\text{A.34})$$

$$P_{2n}(0) = \frac{(-1)^n(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}. \quad (\text{A.35})$$

A.1.4 Polynômes de Laguerre ($\alpha = 0$)

Les polynômes de Laguerre $L_n(x) = L_n^0(x)$ sont orthogonaux par rapport à la fonction poids $w(x) = e^{-x}$ sur l'intervalle $[0, \infty[$. Ils vérifient l'équation différentielle

$$xL_n''(x) + (1 - x)L_n'(x) + nL_n(x) = 0, \quad (\text{A.36})$$

et peuvent être obtenus par récurrence en utilisant les relations suivantes

$$xL_n(x) = -(n + 1)L_{n+1}(x) + (2n + 1)L_n(x) - nL_{n-1}(x), \quad (\text{A.37})$$

$$xL_n'(x) = (n + 1)L_{n+1}(x) + (x - n - 1)L_n(x), \quad (\text{A.38})$$

$$L_n(x) = -L_{n+1}'(x) + L_n'(x). \quad (\text{A.39})$$

Le carré de leur norme vaut (voir le tableau A.2)

$$h_n = 1, \quad (\text{A.40})$$

et les coefficients k_n et k'_n de plus haut degré dans $L_n(x)$ valent

$$k_n = \frac{(-)^n}{n!}, \quad (\text{A.41})$$

$$k'_n = (-)^{n-1} \frac{n}{(n-1)!}. \quad (\text{A.42})$$

En $x = 0$ les polynômes de Laguerre vérifient

$$L_n(0) = 1, \quad (\text{A.43})$$

$$L'_n(0) = n. \quad (\text{A.44})$$

A.2 Règle de quadrature de Gauss

A.2.1 Définition et propriétés

La règle de quadrature de Gauss est une méthode d'approximation d'une intégrale définie. Elle s'écrit sous la forme

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i). \quad (\text{A.45})$$

La fonction $w(x)$ est supposée être une fonction telle que les moments

$$c_k = \int_a^b w(x)x^k dx \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \quad (\text{A.46})$$

sont définis et finis, et que $c_0 \geq 0$. Les x_i sont appelés les points (ou nœuds) de la formule, et les A_i sont les coefficients (ou poids).

La relation (A.45) peut également s'écrire sous la forme

$$\int_a^b g(x)dx \approx \sum_{i=1}^n \lambda_i g(x_i) \quad (\text{A.47})$$

où la fonction poids $w(x)$ n'apparaît plus explicitement. La comparaison des formules (A.45) et (A.47) nous fournit la relation entre les coefficients A_i et λ_i

$$A_i = w(x_i)\lambda_i. \quad (\text{A.48})$$

Nous allons maintenant exposer quelques propriétés de cette règle de quadrature en nous basant sur la forme (A.45). Les démonstrations peuvent être trouvées dans la référence [SS66].

Propriété A.1 *Soient les points x_1, \dots, x_n distincts et un entier $m \geq 1$. Les coefficients A_i peuvent être déterminés de sorte que (A.45) soit exacte pour tout polynôme de degré $\leq n + m - 1$ si et seulement si*

$$p_n(x) = (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n) \quad (\text{A.49})$$

est orthogonal à tous les polynômes de degré $\leq m - 1$.

Propriété A.2 Si la norme h_n du polynôme $p_n(x)$ est non nulle, c'est-à-dire si

$$\int_a^b w(x) [p_n(x)]^2 dx \neq 0, \quad (\text{A.50})$$

alors (A.45) ne peut pas être exacte pour tout polynôme de degré $\leq 2n$.

Nous pouvons donc déduire de ces deux propriétés que la règle de quadrature de Gauss à n points (A.45) associée à une famille de polynômes orthogonaux n'est exacte que pour des polynômes de degré inférieur ou égal à $2n - 1$. Par analogie, la formule (A.47) n'est exacte que pour une fonction qui est le produit de la fonction poids $w(x)$ et d'un polynôme de degré maximum égal à $2n - 1$.

Propriété A.3 Si la fonction poids $w(x)$ est non-négative sur (a, b) , et si (A.45) est exacte pour tout polynôme de degré $\leq 2n - 2$, alors tous les coefficients A_i sont positifs.

Etant donné la relation (A.48), si les coefficients A_i sont positifs, il en est de même des coefficients λ_i .

Nous allons maintenant donner quelques expressions pour les coefficients A_i . La formule de Darboux-Christoffel (A.8) s'écrit, après avoir remplacé y par le zéro x_j de $p_n(x)$

$$\sum_{m=0}^{n-1} \frac{p_m(x)p_m(x_j)}{h_m} = \frac{k_{n-1}}{h_{n-1}k_n} \frac{p_n(x)p_{n-1}(x_j)}{x - x_j}. \quad (\text{A.51})$$

En multipliant cette expression par $w(x)$ et en intégrant, nous obtenons pour le membre de gauche

$$\sum_{m=0}^{n-1} \frac{p_m(x_j)}{h_m} \int_a^b w(x)p_m(x)dx = 1 \quad (\text{A.52})$$

en vertu de (A.2). Dans le membre de droite apparaît l'intégrale

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x) \frac{p_n(x)}{x - x_j} dx &= \sum_{l=1}^n A_l \frac{p_n(x_l)}{x_l - x_j} \\ &= p_n'(x_j) A_j \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

puisque la règle de quadrature de Gauss est exacte dans ce cas-ci. Nous en déduisons

$$A_j = \frac{h_{n-1}k_n}{k_{n-1}p_n'(x_j)p_{n-1}(x_j)}. \quad (\text{A.54})$$

En utilisant la relation de récurrence (A.3), les coefficients A_j peuvent se mettre sous la forme

$$A_j = -\frac{h_{n-1}k_n c_n}{k_{n-1}p_n'(x_j)p_{n+1}(x_j)}. \quad (\text{A.55})$$

Dans le cas particulier des polynômes orthogonaux classiques, il existe également une relation entre $p_n'(x)$ et $p_{n+1}(x)$. Le coefficient A_j devient alors

$$A_j = -\frac{h_{n-1}k_n c_n \alpha_n^{(1)}}{k_{n-1} \sigma(x_j) [p_n'(x_j)]^2} \quad (\text{A.56})$$

où $\sigma(x)$ et $\alpha_n^{(1)}$ ont été définis précédemment.

Même si elle n'est pas exacte la règle de quadrature (A.45) constitue une bonne approximation. En effet elle possède la propriété suivante

Propriété A.4 *Soient la fonction poids $w(x)$ non-négative sur (a, b) et la fonction $f(x)$ continue sur cet intervalle. Soient $x_i^{(n)}$ et $A_i^{(n)}$, $i = 1, \dots, n$, les points et les coefficients de la formule à n points de degré $2n - 1$ pour $w(x)$ et (a, b) . Alors*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n A_i^{(n)} f(x_i^{(n)}) = \int_a^b w(x) f(x) dx. \quad (\text{A.57})$$

Cette propriété nous assure donc de la convergence de l'approximation de Gauss vers la valeur exacte de l'intégrale lorsque le nombre n de points tend vers l'infini. La convergence étant assurée, nous allons examiner l'erreur introduite en utilisant cette approximation.

A.2.2 Estimation de l'erreur

Intégrales à une dimension

Nous étudions l'erreur $R(f)$ sur la formule de quadrature

$$\int_a^b w(x) f(x) dx - \sum_{i=1}^n A_i f(x_i) \equiv R(f) \quad (\text{A.58})$$

en suivant la procédure décrite dans [SS66]. Cette méthode fournit une estimation de l'erreur de la forme

$$|R(f)| \leq CM(f) \quad (\text{A.59})$$

où C est une constante dépendant uniquement de la formule de quadrature, et $M(f)$ est une limite sur une quantité liée à f . Dans le cas présent, $M(f)$ est une limite sur une dérivée d'ordre r de $f(x)$, et nous notons $C = e_r$.

Soit r un nombre entier positif. Nous définissons la classe des fonctions $W^{(r)}(M_r; a, b)$ comme la classe de toutes les fonctions $f(x)$ qui sont définies et continues sur l'intervalle (a, b) , qui ont des dérivées continues jusqu'à l'ordre $r - 1$, et dont la dérivée d'ordre r est continue par morceaux et vérifie

$$|f^{(r)}(x)| \leq M_r \quad \text{pour } x \in (a, b). \quad (\text{A.60})$$

Afin d'estimer l'erreur $R(f)$, nous effectuons un développement de Taylor d'une fonction $f(x)$ de la classe $W^{(r)}(M_r; a, b)$. En partant de l'intégrale

$$\frac{1}{(r-1)!} \int_a^x (x-t)^{r-1} f^{(r)}(t) dt \quad (\text{A.61})$$

et en l'intégrant par parties, nous obtenons le développement

$$f(x) = f(a) + (x-a)f'(a) + \dots + \frac{(x-a)^{r-1}}{(r-1)!} f^{(r-1)}(a) + R_r(x) \quad (\text{A.62})$$

avec le reste R_r qui s'exprime sous forme intégrale

$$R_r(x) = \frac{1}{(r-1)!} \int_a^x (x-t)^{r-1} f^{(r)}(t) dt. \quad (\text{A.63})$$

Après avoir introduit la fonction $K_r(u)$

$$K_r(u) = \begin{cases} u^{r-1} & \text{pour } u \geq 0 \\ 0 & \text{pour } u < 0 \end{cases} \quad (\text{A.64})$$

le reste R_r se réécrit

$$R_r(x) = \frac{1}{(r-1)!} \int_a^b f^{(r)}(t) K_r(x-t) dt. \quad (\text{A.65})$$

Nous considérons maintenant la règle de quadrature

$$\int_a^b w(x) f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n A_k f(x_k) \quad (\text{A.66})$$

que nous supposons exacte pour tout polynôme de degré inférieur ou égal à $r-1$. En utilisant la formule de Taylor, nous pouvons déduire une expression exacte pour l'erreur dans cette formule pour des fonctions de la classe $W^{(r)}(M_r; a, b)$. Nous supposons l'intervalle (a, b) fini.

Soit une fonction $f(x)$ de $W^{(r)}(M_r; a, b)$. Nous développons $f(x)$ en puissances de $x-a$ selon (A.62). Comme notre formule de quadrature est exacte pour tout polynôme de degré inférieur ou égal à $r-1$, nous avons

$$\begin{aligned} & \int_a^b w(x) f(x) dx - \sum_{k=1}^n A_k f(x_k) \\ &= \frac{1}{(r-1)!} \int_a^b w(x) \int_a^b f^{(r)}(t) K_r(x-t) dt dx \\ & \quad - \frac{1}{(r-1)!} \sum_{k=1}^n A_k \int_a^b f^{(r)}(t) K_r(x_k-t) dt \\ &= \frac{1}{(r-1)!} \left[\int_a^b f^{(r)}(t) \int_a^b w(x) K_r(x-t) dx dt \right. \\ & \quad \left. - \int_a^b f^{(r)}(t) \sum_{k=1}^n A_k K_r(x_k-t) dt \right] \\ &= \frac{1}{(r-1)!} \int_a^b \left[\int_t^b w(x) (x-t)^{r-1} dx \right. \\ & \quad \left. - \sum_{k=1}^n A_k K_r(x_k-t) \right] f^{(r)}(t) dt. \end{aligned} \quad (\text{A.67})$$

En introduisant la fonction

$$F_r(t) = \frac{1}{(r-1)!} \left[\int_t^b w(x) (x-t)^{r-1} dx - \sum_{k=1}^n A_k K_r(x_k-t) \right] \quad (\text{A.68})$$

nous obtenons une expression exacte pour l'erreur sur la formule de quadrature (A.66) pour une fonction $f(x)$ de la classe $W^{(r)}(M_r; a, b)$

$$\int_a^b w(x)f(x)dx - \sum_{k=1}^n A_k f(x_k) = \int_a^b F_r(t)f^{(r)}(t)dt. \quad (\text{A.69})$$

Il est important de remarquer que la fonction $F_r(t)$ est indépendante de l'intégrant $f(x)$, et notamment qu'elle ne dépend pas de M_r .

En utilisant (A.60), nous obtenons

$$\left| \int_a^b w(x)f(x)dx - \sum_{k=1}^n A_k f(x_k) \right| \leq M_r \int_a^b |F_r(t)|dt \equiv e_r M_r. \quad (\text{A.70})$$

Dans le cas d'une règle de quadrature de Gauss, la plus grande valeur de r pour laquelle (A.70) est d'application est $r = 2n$, et nous avons alors [Kry62]

$$e_{2n} = \frac{1}{(2n)!k_n^2} \int_a^b w(x) [p_n(x)]^2 dx = \frac{h_n}{(2n)!k_n^2} \quad (\text{A.71})$$

où $p_n(x)$ est le polynôme dont les zéros sont les points de la formule de quadrature. La formule (A.70) est également valable pour tout r compris entre 1 et $2n$, mais dans ces cas e_r ne se calcule pas aussi facilement.

Intégrales multiples

Une expression de l'erreur ayant été déterminée dans le cas à une dimension, nous allons analyser son extension au cas d'intégrales multiples. Considérons tout d'abord le cas d'intégrales doubles que nous approchons à l'aide de la règle de quadrature

$$\int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} w_1(x)w_2(y)f(x,y)dydx \approx \sum_{i=1}^{m_1} \sum_{j=1}^{m_2} A_i B_j f(x_i, y_j). \quad (\text{A.72})$$

Supposons que pour toute fonction $g_1(x)$ d'une certaine classe W_x , nous ayons

$$\left| \int_{a_1}^{b_1} w_1(x)g_1(x)dx - \sum_{i=1}^{m_1} A_i g_1(x_i) \right| \leq c_1, \quad (\text{A.73})$$

et pour toute fonction $g_2(y)$ d'une autre classe W_y

$$\left| \int_{a_2}^{b_2} w_2(y)g_2(y)dy - \sum_{j=1}^{m_2} B_j g_2(y_j) \right| \leq c_2. \quad (\text{A.74})$$

Les constantes c_1 et c_2 sont à mettre en parallèle avec la borne apparaissant dans (A.70). Supposons également que pour tout x, y tel que $a_1 \leq x \leq b_1$ et $a_2 \leq y \leq b_2$, la fonction $f(x, y)$ appartienne aux deux classes W_x et W_y . Alors nous pouvons écrire

$$\left| \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} w_1(x)w_2(y)f(x,y)dydx - \sum_{i=1}^{m_1} \sum_{j=1}^{m_2} A_i B_j f(x_i, y_j) \right|$$

$$\begin{aligned}
&= \left| \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} w_1(x)w_2(y)f(x,y)dydx - \int_{a_2}^{b_2} w_2(y) \sum_{i=1}^{m_1} A_i f(x_i, y) dy \right. \\
&\quad \left. + \sum_{i=1}^{m_1} A_i \int_{a_2}^{b_2} w_2(y)f(x_i, y)dy - \sum_{i=1}^{m_1} \sum_{j=1}^{m_2} A_i B_j f(x_i, y_j) \right| \\
&\leq \int_{a_2}^{b_2} w_2(y) \left| \int_{a_1}^{b_1} w_1(x)f(x, y)dx - \sum_{i=1}^{m_1} A_i f(x_i, y) \right| dy \\
&\quad + \sum_{i=1}^{m_1} |A_i| \left| \int_{a_2}^{b_2} w_2(y)f(x_i, y)dy - \sum_{j=1}^{m_2} B_j f(x_i, y_j) \right| \\
&\leq w_2^0 c_1 + c_2 \sum_{i=1}^{m_1} |A_i| \tag{A.75}
\end{aligned}$$

où

$$w_2^0 = \int_{a_2}^{b_2} w_2(y)dy. \tag{A.76}$$

De la même manière nous pouvons obtenir l'estimation suivante

$$\begin{aligned}
&\left| \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} w_1(x)w_2(y)f(x, y)dydx - \sum_{i=1}^{m_1} \sum_{j=1}^{m_2} A_i B_j f(x_i, y_j) \right| \\
&\leq c_1 \sum_{j=1}^{m_2} |B_j| + w_1^0 c_2. \tag{A.77}
\end{aligned}$$

Si chaque règle de quadrature à une dimension (sur x et sur y) est exacte pour un intégrant constant, et si tous les coefficients A_i et B_j sont positifs, alors les deux estimations précédentes sont identiques. Dans ce cas nous pouvons encore écrire

$$\begin{aligned}
&\left| \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} w_1(x)w_2(y)f(x, y)dydx - \sum_{i=1}^{m_1} \sum_{j=1}^{m_2} A_i B_j f(x_i, y_j) \right| \\
&\leq w_2^0 c_1 + w_1^0 c_2. \tag{A.78}
\end{aligned}$$

Sous ces mêmes hypothèses, il est facile de généraliser la formule donnant une estimation de l'erreur dans le cas d'une intégrale à un nombre quelconque l de dimensions. Celle-ci prend alors la forme

$$\begin{aligned}
&\left| \int_{a_1}^{b_1} \cdots \int_{a_l}^{b_l} W(\bar{y})f(\bar{y})d\bar{y} - \sum_{i_1=1}^{m_1} \cdots \sum_{i_l=1}^{m_l} A_{i_1}^1 \cdots A_{i_l}^l f(x_{i_1}^1, \dots, x_{i_l}^l) \right| \\
&\leq \sum_{k=1}^l c_k \prod_{j \neq k} w_j^0 \tag{A.79}
\end{aligned}$$

en utilisant les notations

$$\begin{aligned}
\bar{y} &= (y_1, \dots, y_l), \\
d\bar{y} &= dy_1 \cdots dy_l, \\
W(\bar{y}) &= w_1(y_1) \cdots w_l(y_l), \\
w_j^0 &= \int_{a_j}^{b_j} w_j(y_j)dy_j.
\end{aligned}$$

Annexe B

Fonctions coulombiennes renormalisées à énergie nulle

Dans cette annexe nous explicitons les fonctions coulombiennes renormalisées (5.34-5.37) et leurs dérivées par rapport à l'énergie, à énergie nulle dans les cas neutre et chargé. Nous notons par des *primes* les dérivées par rapport à l'énergie, et par un exposant 0 les fonctions évaluées à l'énergie nulle. Dans le cas neutre les dérivées par rapport à l'énergie des solutions de l'équation asymptotique (5.34) et (5.35) à énergie nulle sont données par

$$\mathcal{F}_l^{(j)0}(r) = \left(-\frac{\mu}{\hbar^2}\right)^j \frac{r^{l+2j+1}}{(2l+2j+1)!!} \quad (\text{B.1})$$

et

$$\mathcal{G}_l^{(j)0}(r) = \left(\frac{\mu}{\hbar^2}\right)^j (2l-2j-1)!! r^{-l+2j}. \quad (\text{B.2})$$

Dans le cas chargé, les dérivées par rapport à l'énergie des fonctions (5.36) et (5.37) sont obtenues dans la référence [BB00] à partir des propriétés des fonctions coulombiennes [HB59, Hum85]

$$\mathcal{F}_l^0(r) = (\pi r)^{1/2} f_0(x), \quad (\text{B.3})$$

$$\mathcal{G}_l^0(r) = (\pi r)^{1/2} g_0(x), \quad (\text{B.4})$$

avec

$$x = 2(2r/a_N)^{1/2}. \quad (\text{B.5})$$

Les dérivées à énergie nulle sont données par

$$\mathcal{F}_l'^0(r) = \frac{(\pi r)^{1/2}}{12E_N} [p_1 f_0(x) - f_1(x)], \quad (\text{B.6})$$

$$\mathcal{G}_l'^0(r) = \frac{(\pi r)^{1/2}}{12E_N} [p_1 g_0(x) - g_1(x)], \quad (\text{B.7})$$

$$\mathcal{F}_l''^0(r) = \frac{(\pi r)^{1/2}}{(12E_N)^2} [(p_2 - p_1^2) f_0(x) - 2p_1 f_1(x) + f_2(x)], \quad (\text{B.8})$$

$$\mathcal{G}_l''^0(r) = \frac{(\pi r)^{1/2}}{(12E_N)^2} [(p_2 - p_1^2) g_0(x) - 2p_1 g_1(x) + g_2(x)]. \quad (\text{B.9})$$

Dans ces expressions, les fonctions f_i s'écrivent

$$f_0(x) = I_{2l+1}(x), \quad (\text{B.10})$$

$$f_1(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^2 \left[3(l+1)I_{2l+3}(x) + \frac{x}{2}I_{2l+4}(x) \right], \quad (\text{B.11})$$

$$f_2(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^4 \left[9(l+1)(l+2)I_{2l+5}(x) + 6\left(l + \frac{8}{5}\right) \frac{x}{2}I_{2l+6}(x) + \left(\frac{x}{2}\right)^2 I_{2l+7}(x) \right], \quad (\text{B.12})$$

et les fonctions g_i

$$g_0(x) = K_{2l+1}(x), \quad (\text{B.13})$$

$$g_1(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^2 \left[3(l+1)K_{2l+3}(x) - \frac{x}{2}K_{2l+4}(x) \right], \quad (\text{B.14})$$

$$g_2(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^4 \left[9(l+1)(l+2)K_{2l+5}(x) - 6\left(l + \frac{8}{5}\right) \frac{x}{2}K_{2l+6}(x) + \left(\frac{x}{2}\right)^2 K_{2l+7}(x) \right], \quad (\text{B.15})$$

où les fonctions I_n et K_n sont les fonctions de Bessel modifiées [AS65]. Comme l'expression (5.38) contient également des dérivées par rapport à r , nous pouvons utiliser dans le cas chargé

$$\frac{d\mathcal{H}}{dr} = \frac{1}{2r} \left(\mathcal{H} + x \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} \right) \quad (\text{B.16})$$

pour $\mathcal{H} = \mathcal{F}_l^{(j)0}$ et $\mathcal{G}_l^{(j)0}$.

Annexe C

Réseaux de Legendre et de Jacobi translétés

Nous présentons ici les expressions requises pour calculer différents éléments de matrice de la méthode de la matrice R sur réseau de Lagrange. Ces formules constituent des cas particuliers de celles décrites dans l'annexe de la référence [BHSV98] correspondant aux polynômes de Jacobi (α, β) . Nous avons $\alpha = \beta = 0$ pour le réseau de Legendre, et $\alpha = 0, \beta = 2$ pour le réseau de Jacobi $(0,2)$.

C.1 Réseau de Legendre translété

Nous considérons le réseau de Legendre translété défini par les N points ax_n , où les x_n sont les zéros du polynôme de Legendre translété de degré N (2.103). Les poids intervenant dans la règle de quadrature de Gauss-Legendre sont notés λ_n . Les fonctions de Lagrange régularisées $f_n(r)$ de ce réseau sont définies par (5.57) sur l'intervalle $[0, a]$. A l'extrémité a de l'intervalle, nous avons les expressions

$$f_n(a) = (-1)^n a^{-1/2} [x_n(1-x_n)]^{-1/2}, \quad (\text{C.1})$$

$$af'_n(a) = [N^2 + N + 1 - (1-x_n)^{-1}]f_n(a) \quad (\text{C.2})$$

qui interviennent dans les éléments de matrice de l'opérateur de Bloch (5.50).

Le calcul des éléments de matrice de l'énergie cinétique nécessite les expressions

$$a^2 f''_n(ax_n) = -(a\lambda_n)^{-1/2} \frac{N(N+1)x_n(1-x_n) - 3x_n + 1}{3x_n^2(1-x_n)^2} \quad (\text{C.3})$$

et

$$a^2 f''_{n'}(ax_n) = -(-)^{n+n'} (a\lambda_n)^{-1/2} \frac{x_n + x_{n'} - 2x_n^2}{x_{n'}(x_{n'} - x_n)^2} \sqrt{\frac{x_{n'}(1-x_{n'})}{x_n(1-x_n)^3}}. \quad (\text{C.4})$$

C.2 Réseau de Jacobi $(0,2)$ translété

Les polynômes de Jacobi sont définis à l'annexe A. Les N points du réseau ax_n sont donc définis par les N zéros du polynôme de Jacobi $(0,2)$ translété

(5.59). Les poids intervenant dans la règle de quadrature de Gauss-Jacobi sont notés λ_n . Les fonctions de Lagrange sont définies par (5.60). Pour les éléments de matrice de l'opérateur de Bloch (5.50), nous avons besoin des expressions suivantes

$$f_n(a) = (-1)^n a^{-1/2} \sqrt{\frac{x_n}{1-x_n}}, \quad (\text{C.5})$$

$$a f'_n(a) = [N(N+3) + 1 - (1-x_n)^{-1}] f_n(a). \quad (\text{C.6})$$

Les éléments de matrice de l'énergie cinétique évalués à l'approximation de Gauss sont obtenus à partir de

$$a^2 f''_n(ax_n) = -(a\lambda_n)^{-1/2} \frac{[N(N+3) + 8]x_n(1-x_n) + x_n - 3}{3x_n^2(1-x_n)^2} \quad (\text{C.7})$$

et

$$a^2 f''_{n'}(ax_n) = (-)^{n+n'} (a\lambda_n)^{-1/2} \frac{4x_n^2 - 2x_{n'}x_n - 3x_n + x_{n'}}{(x_n - x_{n'})^2} \sqrt{\frac{x_{n'}(1-x_{n'})}{x_n^3(1-x_n)^3}}. \quad (\text{C.8})$$

Le calcul exact des éléments de matrice de l'énergie cinétique et du terme centrifuge nécessite les expressions supplémentaires

$$h_n(r/a) = f_n(r/a) / \sqrt{w(r/a)} = (r/a)^{-1} f_n(r/a), \quad (\text{C.9})$$

$$h_n(0) = (-1)^{N+n+1} \frac{(N+2)!}{2N!} \sqrt{\frac{1-x_n}{x_n}}, \quad (\text{C.10})$$

$$A_l = (l+3)^{-1} - \sum_{k=1}^N \lambda_k x_k^l w(x_k). \quad (\text{C.11})$$

Annexe D

Dérivées des fonctions de Lagrange aux points du réseau

Nous présentons ici les expressions des dérivées premières des fonctions de Lagrange évaluées aux points du réseau associé. Nous considérons les cas des réseaux de Laguerre, Legendre et Legendre translaté.

D.1 Réseau de Laguerre

Les N points x_i du réseau de Laguerre sont définis par (2.106), et les fonctions de Lagrange-Laguerre f_i associées s'écrivent (2.109)

$$f_i(x) = (-)^i x_i^{1/2} \frac{L_N(x)}{x - x_i} e^{-x/2} \quad (\text{D.1})$$

avec le polynôme de Laguerre L_N de degré N . A partir de ces fonctions nous obtenons les expressions suivantes pour leur dérivée première évaluée aux points du réseau

$$f'_i(x_i) = -\frac{\lambda_i^{-1/2}}{2x_i} \quad (\text{D.2})$$

avec les poids de Gauss-Laguerre λ_i (2.107), et

$$f'_i(x_j) = (-)^{i+j} \frac{\lambda_j^{-1/2}}{x_j - x_i} \sqrt{\frac{x_i}{x_j}} \quad (\text{D.3})$$

lorsque $i \neq j$.

Dans le cas des fonctions de Lagrange-Laguerre régularisées \tilde{f}_i , nous définissons les éléments de matrice p_{ij} de l'opérateur $\frac{d}{dx}$

$$p_{ij}^N = \int_0^\infty dx \tilde{f}_i(x) \tilde{f}'_j(x). \quad (\text{D.4})$$

Ces éléments ne sont pas évalués exactement à l'approximation de Gauss. De plus, cette approximation se révèle mauvaise car la matrice d'éléments p_{ij}^N ainsi obtenue n'est pas antisymétrique, alors qu'elle devrait l'être. Nous évaluons donc (D.4) exactement, ce qui nous donne

$$p_{ij}^N = (-)^{i+j} \frac{1}{2} (x_i x_j)^{-1/2} \frac{x_i + x_j}{x_i - x_j} \quad (\text{D.5})$$

pour $i \neq j$, et

$$p_{ii}^N = 0 \quad (\text{D.6})$$

lorsque $i \neq j$.

D.2 Réseau de Legendre

Nous considérons un réseau de Legendre de N points x_i (2.94), et les N fonctions de Lagrange-Legendre g_i (2.97) associées. Les fonctions de Lagrange sont alors données par

$$g_i(x) = (-)^{i+N} \sqrt{\frac{1-x_i^2}{2}} \frac{P_N(x)}{x-x_i} \quad (\text{D.7})$$

avec le polynôme de Legendre P_N de degré N . La dérivée première de cette fonction calculée aux points x_j du réseau vaut alors

$$g_i'(x_i) = \lambda_i^{-1/2} \frac{x_i}{1-x_i^2} \quad (\text{D.8})$$

pour $i = j$, avec les poids de Gauss-Legendre λ_i (2.95), et

$$g_i'(x_j) = (-)^{i+j} \frac{\lambda_j^{-1/2}}{x_j - x_i} \sqrt{\frac{1-x_i^2}{1-x_j^2}} \quad (\text{D.9})$$

lorsque $i \neq j$.

D.3 Réseau de Legendre translaté

Les N points x_i du réseau de Legendre translaté sont déterminés par (2.103). Nous considérons ici les fonctions de Lagrange-Legendre q_i qui s'écrivent (2.105)

$$q_i(x) = (-)^{i+N} \sqrt{x_i(1-x_i)} \frac{P_N(2x-1)}{x-x_i} \quad (\text{D.10})$$

avec le polynôme de Legendre P_N de degré N . Les expressions de la dérivée première de cette fonction évaluée aux points x_j ont la forme suivante

$$q_i'(x_i) = \lambda_i^{-1/2} \frac{2x_i - 1}{2x_i(1-x_i)} \quad (\text{D.11})$$

pour $i = j$, avec les poids λ_i de ce réseau définis par (2.104), et

$$q_i'(x_j) = (-)^{i+j} \frac{\lambda_j^{-1/2}}{x_j - x_i} \sqrt{\frac{x_i(1-x_i)}{x_j(1-x_j)}} \quad (\text{D.12})$$

pour $i \neq j$.

Annexe E

Méthodes mixte et “tout réseau” : opérateurs et éléments de matrice

Dans cette annexe nous explicitons certains opérateurs apparaissant dans le hamiltonien d’un système nucléaire à trois corps, ainsi que leurs éléments de matrice dans le cadre des méthodes mixte et “tout réseau”. Les notations utilisées sont celles du chapitre 7.

E.1 Méthode mixte

Nous considérons tout d’abord l’interaction cœur-neutron définie par (7.2). La partie spin-orbite de cette interaction est donnée par $U_{cn}^{so}(r_i)\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i$ où i identifie le neutron extérieur ($i = 1, 2$). Nous nous limitons dans la suite de ce paragraphe à $i = 1$, les différents résultats obtenus pouvant être facilement transposés au deuxième neutron, étant donné la symétrie d’échange de ceux-ci. Le terme spin-orbite couple donc le spin \mathbf{s}_1 du neutron à son moment cinétique orbital \mathbf{l}_1 qui s’écrit

$$\mathbf{l}_1 = \mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1 + \frac{1}{A_c + 1} \mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2 \quad (\text{E.1})$$

en fonction des impulsions \mathbf{p}_i associées aux coordonnées relatives cœur-neutron \mathbf{r}_i . Le premier terme correspond au moment cinétique orbital du mouvement relatif entre le cœur et le neutron. Le deuxième terme peut être vu comme une correction du centre de masse, puisque ce dernier n’est pas localisé exactement à la position du cœur. Ce terme devient évidemment de plus en plus petit lorsque la masse du cœur augmente. Les éléments de matrice de ce terme spin-orbite dans la base (7.7) s’écrivent

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{li_1i_2}^S | U_{cn}^{so}(r_1) \mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{s}_1 | \Phi_{l'i_1'i_2}^{S'} \rangle &= \langle \Phi_{li_1i_2}^S | U_{cn}^{so}(r_1) (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{s}_1 | \Phi_{l'i_1'i_2}^{S'} \rangle \\ &+ \frac{1}{A_c + 1} \langle \Phi_{li_1i_2}^S | U_{cn}^{so}(r_1) (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{s}_1 | \Phi_{l'i_1'i_2}^{S'} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

Le premier terme peut se calculer en utilisant le théorème de Wigner-Eckart [CDL73, Ros61], et le fait que l’opérateur $\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1$ est associé au nombre quantique orbital l des fonctions de base. Les éléments de matrice du premier terme

de (E.2) sont alors donnés explicitement par

$$\langle \Phi_{l_1 i_2}^S | U_{cn}^{so}(r_1) (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{s}_1 | \Phi_{l'_1 i'_2}^{S'} \rangle \approx \delta_{l'l'} \delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} \frac{U_{cn}^{so}(hr_{i_1}) + U_{cn}^{so}(hr_{i_2})}{2} G_l^{SS'} \quad (\text{E.3})$$

en utilisant l'approximation de Gauss pour les intégrales radiales, et où $G_l^{SS'}$ représente un facteur angulaire qui vaut

$$G_l^{SS'} = \begin{cases} 0 & (S = S' = 0), \\ -\frac{1}{2} \sqrt{l(l+1)} & (S = 1, S' = 0), \\ -\frac{1}{2} & (S = S' = 1) \end{cases} \quad (\text{E.4})$$

en fonction des spins S et S' . Le deuxième terme de (E.2) conduit à une expression plus compliquée puisqu'il fait intervenir les vecteurs \mathbf{r}_1 et \mathbf{p}_2 correspondants aux deux neutrons. L'impulsion \mathbf{p}_2 étant un opérateur différentiel, ce terme fait apparaître un opérateur dérivée première agissant sur la variable radiale r_2 . En utilisant le théorème de Wigner-Eckart et ses corollaires [VMK88], nous pouvons déterminer l'expression de cet opérateur en calculant les éléments de matrice de l'opérateur $(\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{s}_1$ entre les parties angulaires des fonctions de base (7.7)

$$\langle [[Y_l(\Omega_1) \otimes Y_l(\Omega_2)]^L \otimes \chi^S]^{00} | (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{s}_1 | [[Y_{l'}(\Omega_1) \otimes Y_{l'}(\Omega_2)]^{L'} \otimes \chi^{S'}]^{00} \rangle = \left[-\mathcal{C}_1^{ll'} r_1 \partial_{r_2} + (\mathcal{C}_1^{ll'} - \mathcal{C}_2^{ll'}) \frac{r_1}{r_2} \right] \quad (\text{E.5})$$

lorsque $S \neq S'$. Ces éléments sont en effet nuls si $S = S'$. Les coefficients $\mathcal{C}_1^{ll'}$ et $\mathcal{C}_2^{ll'}$ s'écrivent respectivement

$$\mathcal{C}_1^{ll'} = \frac{3\sqrt{2}}{2} (-)^S (2l+1)(2l'+1) \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ l & l & S \\ l' & l' & S' \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \quad (\text{E.6})$$

et

$$\mathcal{C}_2^{ll'} = \frac{3\sqrt{2}}{2} (-)^S \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ l & l & S \\ l' & l' & S' \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} [l' \sqrt{l'+1} \delta_{l,l'+1} + (l'+1) \sqrt{l'} \delta_{l,l'+-1}] \quad (\text{E.7})$$

en utilisant les égalités $L = S$ et $L' = S'$ dans les fonctions de base (7.7). Les éléments de matrice du deuxième terme du couplage spin-orbite (E.2) sont finalement égaux aux éléments de matrice de l'opérateur (E.5) entre fonctions de base radiales (7.8)

$$\langle \Phi_{l_1 i_2}^S | U_{cn}^{so}(r_1) (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{s}_1 | \Phi_{l'_1 i'_2}^{S'} \rangle \approx (1 - \delta_{SS'}) \left\{ -N_{i_1 i_2} N_{i'_1 i'_2} \mathcal{C}_1^{ll'} \left(U_{cn}^{so}(hr_{i_1}) r_{i_1} \delta_{i_1 i'_1} p_{i_2 i'_2}^N + U_{cn}^{so}(hr_{i_1}) r_{i_1} \delta_{i_1 i'_2} p_{i_2 i'_1}^N \right) + U_{cn}^{so}(hr_{i_2}) r_{i_2} \delta_{i_2 i'_1} p_{i_1 i'_2}^N + U_{cn}^{so}(hr_{i_2}) r_{i_2} \delta_{i_2 i'_2} p_{i_1 i'_1}^N \right\} + (\mathcal{C}_1^{ll'} - \mathcal{C}_2^{ll'}) \delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} \frac{1}{2} \left(U_{cn}^{so}(hr_{i_1}) \frac{r_{i_1}}{r_{i_2}} + U_{cn}^{so}(hr_{i_2}) \frac{r_{i_2}}{r_{i_1}} \right) \quad (\text{E.8})$$

où $N_{i_1 i_2}$ est le facteur de normalisation des fonctions radiales (7.8), et p_{ij}^N est l'élément de matrice à une dimension de l'opérateur $\frac{d}{dr}$ entre fonctions de Lagrange-Laguerre (D.4).

Nous examinons maintenant les éléments de matrice de l'interaction neutron-neutron V_{nn} entre les fonctions de base (7.7). Cette interaction est donnée explicitement par (7.4), et contient un terme central, un terme spin-orbite et un terme tensoriel. Le traitement de cette interaction dans la base mixte (7.7) requiert un développement multipolaire du potentiel, que nous écrivons

$$V_{nn}^j(r_{12}) = \sum_{\lambda} V_{\lambda}^j(r_1, r_2) P_{\lambda}(\cos \theta_{12}) \quad (\text{E.9})$$

où $P_{\lambda}(x)$ est le polynôme de Legendre de degré λ , et θ_{12} est l'angle entre les vecteurs cœur-neutron \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 . L'indice j identifie le potentiel radial, $j = c$, so ou T respectivement pour les parties centrale, spin-orbite et tensorielle de l'interaction neutron-neutron. Le facteur $P_{\lambda}(\cos \theta_{12})$ peut s'exprimer en fonction des coordonnées angulaires $\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2$ des deux coordonnées relatives \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 à l'aide d'harmoniques sphériques [CDL73]

$$P_{\lambda}(\cos \theta_{12}) = \frac{4\pi}{2\lambda + 1} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} Y_{\mu}^{\lambda*}(\Omega_1) Y_{\mu}^{\lambda}(\Omega_2) \quad (\text{E.10})$$

$$= \frac{4\pi}{2\lambda + 1} Y^{\lambda}(\Omega_1) \cdot Y^{\lambda}(\Omega_2) \quad (\text{E.11})$$

où la deuxième ligne représente la notation sous forme de produit scalaire des deux harmoniques sphériques [Ros61].

Dans le terme spin-orbite apparaît l'opérateur de couplage $\mathbf{l}_{12} \cdot \mathbf{S}$, où $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$ est le spin total des deux neutrons et le moment cinétique orbital relatif entre les deux neutrons \mathbf{l}_{12} s'écrit (7.5)

$$\mathbf{l}_{12} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \quad (\text{E.12})$$

$$= \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1 + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{p}_2 - \mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2 - \mathbf{r}_2 \times \mathbf{p}_1) \quad (\text{E.13})$$

où \mathbf{p}_i est l'impulsion associée à la coordonnée relative \mathbf{r}_i . Nous ne donnons ici que les expressions pour les éléments de matrice des termes $\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1$ et $\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2$, les deux autres pouvant en être déduits par permutation des indices 1 et 2 des deux neutrons. Le terme $\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1$ donne lieu aux éléments de matrice suivants entre fonctions (7.7)

$$\langle \Phi_{i_1 i_2}^S | V_{nn}^{so}(\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{S} | \Phi_{i'_1 i'_2}^{S'} \rangle \approx \delta_{SS'} \delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} \sum_{\lambda} V_{\lambda}^{so}(hr_{i_1}, hr_{i_2}) \mathcal{B}_{\lambda}^{ll'} \quad (\text{E.14})$$

où le coefficient angulaire $\mathcal{B}_{\lambda}^{ll'}$ est défini par

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{\lambda}^{ll'} &= \sqrt{3}(-)^{l+l'} (2L+1) \sqrt{S(S+1)(2S+1)(2l+1)(2l'+1)} \\ &\quad \sqrt{(2l'+1)l'(l'+1)(2\lambda+1)} \left\{ \begin{matrix} L & S & 1 \\ S' & L' & 1 \end{matrix} \right\} \left(\begin{matrix} l & \lambda & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right)^2 \\ &\quad \sum_k (2k+1) \left\{ \begin{matrix} k & \lambda & 1 \\ l & l & L \\ l' & l' & L' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda & \lambda & 0 \\ 1 & 1 & k \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda & 1 & k \\ l' & l & l' \end{matrix} \right\} \quad (\text{E.15}) \end{aligned}$$

où apparaissent des coefficients 3jm, 6j et 9j [VMK88, Wig59], et où la somme sur k est limitée par les relations triangulaires devant être satisfaites lors des couplages des différents moments cinétiques.

Les éléments de matrice du terme $(\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{S}$ peuvent quant à eux s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{li_1i_2}^S | V_{nn}^{so}(\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{S} | \Phi_{l'i_1'i_2}^{S'} \rangle &\approx \delta_{SS'} \sum_{\lambda} N_{i_1i_2} N_{i_1'i_2'} V_{\lambda}^{so}(hr_{i_1}, hr_{i_2}) \\ &\left(r_{i_1} p_{i_2i_2'}^N \delta_{i_1i_1'} + r_{i_1} p_{i_2i_1'}^N \delta_{i_1i_2'} + r_{i_2} p_{i_1i_2'}^N \delta_{i_2i_1'} + r_{i_2} p_{i_1i_1'}^N \delta_{i_2i_2'} \right) \mathcal{D}_{\lambda}^{ll'} \\ &+ \delta_{i_1i_1'} \delta_{i_2i_2'} V_{\lambda}^{so}(hr_{i_1}, hr_{i_2}) \frac{1}{2} \left(\frac{r_{i_1}}{r_{i_2}} + \frac{r_{i_2}}{r_{i_1}} \right) \mathcal{G}_{\lambda}^{ll'} \quad (\text{E.16}) \end{aligned}$$

en utilisant la symétrie de permutation des variables r_1 et r_2 dans le potentiel $V_{\lambda}(r_1, r_2)$. Les coefficients angulaires $\mathcal{D}_{\lambda}^{ll'}$ sont donnés par l'expression

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\lambda}^{ll'} &= 3\sqrt{2}(2L+1)\sqrt{S(S+1)(2S+1)(2l+1)(2l'+1)\sqrt{2\lambda+1}} \\ &\left\{ \begin{matrix} L & S & 1 \\ S' & L' & 1 \end{matrix} \right\} \sum_{j_1, j_2, j_3, j_4} (-)^{j_1+j_2+j_3+j_4+\lambda} (2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1) \\ &(2j_4+1) \left\{ \begin{matrix} \lambda & \lambda & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ j_3 & j_4 & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_3 & j_4 & 1 \\ l & l & L \\ l' & l' & L' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda & 1 & j_3 \\ l' & l & j_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda & 1 & j_4 \\ l' & l & j_2 \end{matrix} \right\} \\ &\left(\begin{matrix} l & \lambda & j_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} j_1 & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} l & \lambda & j_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} j_2 & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \quad (\text{E.17}) \end{aligned}$$

où à nouveau les nombres j_1, j_2, j_3 et j_4 sont contraints par les différentes relations triangulaires provenant des coefficients de couplage des moments cinétiques. Les coefficients $\mathcal{G}_{\lambda}^{ll'}$ s'écrivent

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\lambda}^{ll'} &= \frac{3\sqrt{3}}{2} (2L+1) \sqrt{S(S+1)(2S+1)(2l+1)(2l'+1)} \\ &\sqrt{l'(l'+1)(2l'+1)(2\lambda+1)} \left\{ \begin{matrix} L & S & 1 \\ S' & L' & 1 \end{matrix} \right\} \\ &\sum_{j_1, j_2, j_3, j_4} (-)^{j_1+l'+\lambda} (2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)(2j_4+1) \left\{ \begin{matrix} \lambda & \lambda & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ j_3 & j_4 & 1 \end{matrix} \right\} \\ &\left\{ \begin{matrix} j_3 & j_4 & 1 \\ l & l & L \\ l' & l' & L' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda & 1 & j_3 \\ l' & l & j_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda & 1 & j_4 \\ l' & l & j_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 1 \\ l' & j_2 & l' \end{matrix} \right\} \\ &\left(\begin{matrix} l & \lambda & j_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} j_1 & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} l & \lambda & j_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} j_2 & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right). \quad (\text{E.18}) \end{aligned}$$

Pour le terme tensoriel de l'interaction neutron-neutron nous considérons un potentiel de la forme (7.4)

$$V_{nn}^{\text{tensoriel}} = V_{nn}^T(r_{12})r_{12}^2 S_{12}, \quad (\text{E.19})$$

le facteur r_{12}^2 étant nécessaire afin de faciliter la détermination des éléments de matrice de l'opérateur tensoriel S_{12} , qui est défini par (7.6). Pour évaluer les éléments de matrice du potentiel (E.19), le potentiel V_{nn}^T doit être développé en multipôles (E.9). Ses éléments de matrice peuvent alors être déterminés en utilisant le théorème de Wigner-Eckart et ses corollaires [VMK88], et nous obtenons finalement

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{li_1i_2}^S | V_{nn}^{tensoriel} | \Phi_{l'i_1'i_2}^{S'} \rangle &\approx h^2 \delta_{SS'} \delta_{S1} \delta_{i_1i_1'} \delta_{i_2i_2'} \\ &\sum_{\lambda} V_{\lambda}^T(hr_{i_1}, hr_{i_2}) ((r_{i_1}^2 + r_{i_2}^2) \mathcal{H}_{\lambda}^{l'l'} - r_{i_1} r_{i_2} \mathcal{I}_{\lambda}^{l'l'}) \end{aligned} \quad (\text{E.20})$$

où les coefficients angulaires $\mathcal{H}_{\lambda}^{l'l'}$ et $\mathcal{I}_{\lambda}^{l'l'}$ sont respectivement égaux à

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\lambda}^{l'l'} &= 2\sqrt{30}(2l+1)(2l'+1) \begin{pmatrix} l & \lambda & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &\sum_k (2k+1) \begin{pmatrix} 2 & \lambda & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & k & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} k & \lambda & 2 \\ l & l & 1 \\ l' & l' & 1 \end{matrix} \right\} \end{aligned} \quad (\text{E.21})$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{\lambda}^{l'l'} &= 60(2l+1)(2l'+1) \sum_{j_1, j_2, j_3, j_4} (-)^{j_3+1} (2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1) \\ &(2j_4+1) \left\{ \begin{matrix} j_4 & j_3 & 2 \\ 1 & 1 & \lambda \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l' & l & j_4 \\ l' & l & j_3 \\ 1 & 1 & 2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda & 1 & j_4 \\ l & l' & j_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda & 1 & j_3 \\ l & l' & j_2 \end{matrix} \right\} \\ &\begin{pmatrix} l & 1 & j_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & \lambda & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & j_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & \lambda & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{E.22})$$

Nous rappelons ici la méthode du pseudo-potential [KNOS83] permettant d'éliminer les états interdits pouvant apparaître dans le potentiel cœur-neutron. Le pseudo-potential qui est ajouté au hamiltonien du système à trois corps peut s'écrire [Bay97]

$$V^{pseudo} = \Lambda \sum_{FS} |\psi_{FS}\rangle \langle \psi_{FS}|, \quad (\text{E.23})$$

où la somme porte sur tous les états interdits, et où intervient un projecteur $|\psi_{FS}\rangle \langle \psi_{FS}|$ sur ceux-ci. Le facteur Λ sert à augmenter fortement l'énergie de ces états, ceux-ci se retrouvant dans la partie haute énergie du spectre du système à trois corps. Les éléments de matrice du pseudo-potential dans la base (7.7) s'écrivent comme les sommes sur les différents états interdits d'expressions données approximativement par

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{li_1i_2}^S | \psi_{FS} \rangle \langle \psi_{FS} | \Phi_{l'i_1'i_2}^{S'} \rangle &= N_{i_1i_2} N_{i_1'i_2} \delta_{SS'} \delta_{l_{FS}} \delta_{l'_{FS}} (C_{i_1} C_{i_1'} \delta_{i_2i_2'} + C_{i_2} C_{i_2'} \delta_{i_1i_1'} \\ &+ C_{i_1} C_{i_2'} \delta_{i_2i_1'} + C_{i_2} C_{i_1'} \delta_{i_1i_2'}), \end{aligned} \quad (\text{E.24})$$

où les coefficients C_i représentent la fonction d'onde de l'état interdit obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger radiale avec le potentiel

$$V(r) = U_{cn}^c(r) + U_{cn}^{so}(r) \quad (\text{E.25})$$

pour l'onde partielle adéquate, dans la base des fonctions de Lagrange-Laguerre à une dimension $f_i(r)$ [Bay97]. L'expression (E.24) ne constitue qu'une approximation. En effet le projecteur sur une certaine onde partielle prend une forme beaucoup plus compliquée dans le cas des coordonnées relatives car celles-ci ne constituent pas un ensemble de coordonnées orthogonales.

E.2 Méthode “tout réseau”

Nous examinons dans ce paragraphe les expressions de quelques opérateurs apparaissant dans le hamiltonien du système à trois corps (7.1) dans les coordonnées $r_1, r_2, x, \alpha, \beta, \gamma$ (section 7.3.2), ainsi que leurs éléments de matrice dans la base de fonctions (7.30).

Les opérateurs $\mathbf{p}_1^2, \mathbf{p}_2^2$ et $\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2$ intervenant dans la définition de l'énergie cinétique sont donnés par les expressions suivantes dans la méthode “tout réseau”

$$\begin{aligned} \hbar^{-2}\mathbf{p}_1^2 = & -\partial_{r_1}^2 - \frac{1}{r_1^2} \left[(1-x^2)\partial_x^2 - 2x\partial_x - \hbar^{-2}\mathbf{L}^2 \right. \\ & + \left(\frac{x^2}{1-x^2} - 1 + 2\cotan\beta \cos\alpha \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} \right) \partial_\alpha^2 \\ & + 2\sin\alpha \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} \partial_\alpha \partial_\beta + 2\cos\alpha \sqrt{1-x^2} \partial_\beta \partial_x \\ & - 2\frac{\cos\alpha}{\sin\beta} \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} \partial_\alpha \partial_\gamma - 2\cotan\beta \sin\alpha \sqrt{1-x^2} \partial_\alpha \partial_x \\ & \left. + 2\frac{\sin\alpha}{\sin\beta} \sqrt{1-x^2} \partial_\gamma \partial_x \right], \end{aligned} \quad (\text{E.26})$$

$$\hbar^{-2}\mathbf{p}_2^2 = -\partial_{r_2}^2 - \frac{1}{r_2^2} \left((1-x^2)\partial_x^2 - 2x\partial_x + \frac{1}{1-x^2} \partial_\alpha^2 \right), \quad (\text{E.27})$$

et

$$\begin{aligned} \hbar^{-2}\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 = & x\partial_{r_1}\partial_{r_2} + \frac{1}{r_2} \left((1-x^2)\partial_x - x \right) \partial_{r_1} \\ & + \frac{1}{r_1} \left((1-x^2)\partial_x - x - \frac{\sin\alpha}{\tan\beta} \sqrt{1-x^2} \partial_\alpha + \cos\alpha \sqrt{1-x^2} \partial_\beta \right. \\ & \left. + \frac{\sin\alpha}{\sin\beta} \sqrt{1-x^2} \partial_\gamma \right) + \frac{1}{r_1 r_2} \left(-x(1-x^2)\partial_x^2 + (3x^2-1)\partial_x \right. \\ & + x - \left(\frac{\cos\alpha}{\tan\beta} + \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} \right) \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \partial_\alpha^2 - \frac{\sin\alpha}{\sqrt{1-x^2}} \partial_\alpha \partial_\beta \\ & + \frac{\cos\alpha}{\sin\beta \sqrt{1-x^2}} \partial_\alpha \partial_\gamma + \frac{\sin\alpha}{\tan\beta} x \sqrt{1-x^2} \partial_\alpha \partial_x \\ & - \cos\alpha x \sqrt{1-x^2} \partial_\beta \partial_x - \frac{\sin\alpha}{\sin\beta} x \sqrt{1-x^2} \partial_\gamma \partial_x \\ & \left. + \frac{\sin\alpha}{\tan\beta} \sqrt{1-x^2} \partial_\alpha - \cos\alpha \sqrt{1-x^2} \partial_\beta - \frac{\sin\alpha}{\sin\beta} \sqrt{1-x^2} \partial_\gamma \right) \end{aligned} \quad (\text{E.28})$$

où \mathbf{L} est le moment cinétique orbital total. L’asymétrie des expressions (E.26) et (E.27) provient du choix des angles d’Euler (7.19).

Dans le cas de la méthode “tout réseau” la dépendance en les trois angles d’Euler α, β, γ est traitée analytiquement. Nous évaluons donc exactement les éléments de matrice du hamiltonien entre les parties “angles d’Euler” des fonctions de base (7.30). Ces fonctions des angles d’Euler sont notées $G^S(\alpha, \beta, \gamma)$ et sont définies par (7.32). Les opérateurs $\mathbf{p}_1^2, \mathbf{p}_2^2$ et $\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2$ (E.26-E.28) étant indépendants du spin \mathbf{S} , les éléments de matrice de ces opérateurs entre fonctions de base (7.30) de la méthode “tout réseau” sont diagonaux vis-à-vis du spin S , c’est-à-dire qu’ils sont proportionnels à $\delta_{SS'}$. Lorsque $S = 0$ la fonction des angles d’Euler G^S se réduit à l’état de spin zéro, et les éléments de matrice des opérateurs définissant l’énergie cinétique deviennent

$$\hbar^{-2} \langle G^{S=0} | \mathbf{p}_1^2 | G^{S=0} \rangle = -\partial_{r_1}^2 - \frac{1}{r_1^2} \left[(1-x^2) \partial_x^2 - 2x \partial_x \right], \quad (\text{E.29})$$

$$\hbar^{-2} \langle G^{S=0} | \mathbf{p}_2^2 | G^{S=0} \rangle = -\partial_{r_2}^2 - \frac{1}{r_2^2} \left[(1-x^2) \partial_x^2 - 2x \partial_x \right], \quad (\text{E.30})$$

et

$$\begin{aligned} \hbar^{-2} \langle G^{S=0} | \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 | G^{S=0} \rangle &= x \partial_{r_1} \partial_{r_2} + \left(\frac{1}{r_2} \partial_{r_1} + \frac{1}{r_1} \partial_{r_2} \right) \left((1-x^2) \partial_x - x \right) \\ &\quad + \frac{1}{r_1 r_2} \left(-x(1-x^2) \partial_x^2 + (3x^2 - 1) \partial_x + x \right). \end{aligned} \quad (\text{E.31})$$

Lorsque $S = 1$ la fonction G^S dépend des trois angles d’Euler et des états de spin 1. Des termes supplémentaires apparaissent donc dans les expressions des éléments de matrice des opérateurs cinétiques par rapport au cas $S = 0$. Ces éléments peuvent s’écrire

$$\hbar^{-2} \langle G^{S=1} | \mathbf{p}_i^2 | G^{S=1} \rangle = \hbar^{-2} \langle G^{S=0} | \mathbf{p}_i^2 | G^{S=0} \rangle - \frac{1}{r_i^2} \frac{1}{1-x^2}, \quad (\text{E.32})$$

avec $i = 1$ ou 2 , et

$$\begin{aligned} \hbar^{-2} \langle G^{S=1} | \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 | G^{S=1} \rangle &= \hbar^{-2} \langle G^{S=0} | \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 | G^{S=0} \rangle \\ &\quad + \frac{1}{r_1 r_2} \frac{x}{1-x^2}. \end{aligned} \quad (\text{E.33})$$

Nous considérons maintenant la partie spin-orbite de l’interaction cœur-neutron (7.2). Comme dans le cas de la méthode mixte nous ne présentons ici que les résultats pour le terme

$$U_{cn}^{so} = U_{cn}^{so}(r_1) \mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{s}_1 \quad (\text{E.34})$$

pour un neutron, le cas du deuxième neutron pouvant en être déduit en permutant les indices correspondant aux deux neutrons. Dans (E.34) \mathbf{s}_1 représente le spin du neutron, et \mathbf{l}_1 son moment cinétique orbital, qui est défini par (E.1).

Nous traitons séparément les deux termes provenant de la définition de l'opérateur \mathbf{l}_1 .

Afin de faire apparaître les coordonnées de la méthode "tout réseau", nous exprimons l'opérateur $\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1$ en fonction des angles d'Euler et de l'angle θ_{12} entre les coordonnées relatives cœur-neutron. Cette dernière variable, qui est directement reliée à la coordonnée angulaire x ($x = \cos \theta_{12}$), nous sert d'intermédiaire de calculs. Nous obtenons alors pour les composantes cartésiennes x, y, z de l'opérateur $\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1$ les expressions

$$\begin{aligned} -i[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1]_x &= \left(\sin \varphi_1 \sin \alpha \cotan \theta_{12} + \frac{\cotan \theta_1 \cos \varphi_1}{\cos \alpha \sin \theta_{12}} \right. \\ &\quad \left. \times (\sin \theta_1 \sin^2 \alpha \cos \theta_{12} - \sin \theta_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1)) \right) \partial_\alpha \\ &\quad + \sin \varphi_1 \partial_\beta + \cotan \theta_1 \cos \varphi_1 \partial_\gamma \\ &\quad - (\sin \varphi_1 \cos \alpha + \cos \theta_1 \cos \varphi_1 \sin \alpha) \partial_{\theta_{12}}, \end{aligned} \quad (\text{E.35})$$

$$\begin{aligned} -i[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1]_y &= \left(-\cos \varphi_1 \sin \alpha \cotan \theta_{12} + \frac{\cotan \theta_1 \sin \varphi_1}{\cos \alpha \sin \theta_{12}} \right. \\ &\quad \left. (\sin \theta_1 \sin^2 \alpha \cos \theta_{12} - \sin \theta_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1)) \right) \partial_\alpha \\ &\quad - \cos \varphi_1 \partial_\beta + \cotan \theta_1 \sin \varphi_1 \partial_\gamma \\ &\quad + (\cos \varphi_1 \cos \alpha - \cos \theta_1 \sin \varphi_1 \sin \alpha) \partial_{\theta_{12}}, \end{aligned} \quad (\text{E.36})$$

$$\begin{aligned} -i[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1]_z &= -\frac{1}{\cos \alpha \sin \theta_{12}} (\sin \theta_1 \sin^2 \alpha \cos \theta_{12} - \sin \theta_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1)) \partial_\alpha \\ &\quad - \partial_\gamma + \sin \theta_1 \sin \alpha \partial_{\theta_{12}}, \end{aligned} \quad (\text{E.37})$$

où apparaissent les coordonnées sphériques (θ_1, φ_1) et (θ_2, φ_2) des vecteurs \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 .

Lors du calcul des éléments de matrice du terme spin-orbite dans la base (7.30), trois cas de figure se présentent selon que les deux fonctions de base ont toutes deux un spin 0 ($S = S' = 0$), un spin 1 ($S = S' = 1$), ou des spins différents ($S = 0$ et $S' = 1$). Dans le cas $S = S' = 0$, les éléments de matrice sont nuls. Ceci peut se voir en appliquant le théorème de Wigner-Eckart, ce qui nous conduit à une règle de sélection sous la forme d'une relation triangulaire entre S, S' et 1, qui ne peut être satisfaite si $S = S' = 0$. Considérons maintenant les termes de couplage entre les spins $S = 0$ et $S' = 1$. Dans ce cas nous obtenons pour l'opérateur $(\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{s}_1$ les éléments suivants entre fonctions G^S (7.32)

$$\begin{aligned} \langle G^{S=0} | (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{s}_1 | G^{S'=1} \rangle &= \frac{1}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \sin \beta \int_0^{2\pi} d\gamma \\ &\quad \left[i[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1]_x (\sin \gamma \cos \alpha + \sin \alpha \cos \beta \cos \gamma) \right. \\ &\quad - i[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1]_y (\cos \gamma \cos \alpha - \sin \alpha \cos \beta \sin \gamma) \\ &\quad \left. - i[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1]_z (\sin \alpha \sin \beta) \right] \end{aligned} \quad (\text{E.38})$$

après avoir fait agir l'opérateur de spin \mathbf{s}_1 sur les états de spin de la fonction $G^{S'=1}$. L'intégration sur les angles d'Euler suivant l'évaluation de l'action des trois opérateurs $[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1]_k$ ($k = x, y, z$) sur les fonctions des angles d'Euler, nous fournit les éléments de matrice

$$\langle G^{S=0} | (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{s}_1 | G^{S'=1} \rangle = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{1-x^2} \partial_x + \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} \right). \quad (\text{E.39})$$

Les éléments de matrice du premier terme de l'interaction spin-orbite (E.34) entre fonctions de base (7.30) de spins différents valent finalement

$$\langle \Phi_{i_1 i_2 k}^{S=0} | U_{cn}^{so}(r_1) (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{s}_1 | \Phi_{i'_1 i'_2 k'}^{S'=1} \rangle \approx \delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} \frac{U_{cn}^{so}(hr_{i_1}) + U_{cn}^{so}(hr_{i_2})}{4} \left(\frac{2x_k}{1-x_k^2} \delta_{kk'} - \lambda_k^{1/2} \frac{1-x_k^2}{\sqrt{1-x_k^2}} g_{k'}^{N_x}(x_k) \right) \quad (\text{E.40})$$

à l'approximation de Gauss. Il faut noter que l'approximation de Gauss-Legendre sur la coordonnée x est exacte dans ce cas-ci. La dérivée de la fonction de Lagrange-Legendre $g_k^{N_x}$ évaluée aux points x_k du réseau de Legendre est explicitée à l'annexe D, et les λ_k sont les poids de Gauss-Legendre associés à ce réseau.

Nous suivons la même procédure que ci-dessus pour déterminer les éléments de matrice du premier terme de l'interaction spin-orbite entre fonctions de base (7.30) de même spin $S = S' = 1$. Nous obtenons dans ce cas

$$\langle G^{S=1} | (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{s}_1 | G^{S'=1} \rangle = -\frac{1}{2}. \quad (\text{E.41})$$

Les éléments de matrice entre fonctions (7.30) de la méthode "tout réseau" sont alors obtenus très simplement à l'approximation de Gauss

$$\langle \Phi_{i_1 i_2 k}^{S=1} | U_{cn}^{so}(r_1) (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{s}_1 | \Phi_{i'_1 i'_2 k'}^{S'=1} \rangle \approx -\frac{U_{cn}^{so}(hr_{i_1}) + U_{cn}^{so}(hr_{i_2})}{4} \delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} \delta_{kk'}. \quad (\text{E.42})$$

Le deuxième terme de l'interaction spin-orbite, $(\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{s}_1$, donne lieu à des expressions plus compliquées, car dans ce cas-ci les vecteurs \mathbf{r}_1 et \mathbf{p}_2 correspondent aux deux neutrons. Il fait donc apparaître des opérateurs différentiels comme dans le cas de la méthode mixte. D'après les résultats obtenus sur ce terme dans le cadre de la méthode mixte, le seul cas n'aboutissant pas à des éléments de matrice nuls correspond au terme de couplage des spins 0 et 1. Seul le cas $S = 0$ et $S' = 1$ doit donc être considéré. La procédure de détermination des éléments de matrice est toujours la même que pour le premier terme, et nécessite d'exprimer l'opérateur $\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2$ en fonction d'opérateurs agissant sur les trois angles d'Euler et sur x . Comme expliqué précédemment, ces opérateurs contiennent également des opérateurs différentiels agissant sur la coordonnée r_2 . Nous ne donnons pas ces expressions ici, celles-ci étant similaires à (E.35-E.37), mais plus longues.

Les éléments de matrice de $(\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{s}_1$ entre les fonctions des angles d'Euler G^S (7.32) sont obtenus, après calculs, sous la forme

$$\begin{aligned} \langle G^{S=0} | (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{s}_1 | G^{S'=1} \rangle &= -\frac{1}{2} \left(\sqrt{1-x^2} r_1 \partial_{r_2} - \frac{r_1}{r_2} x \sqrt{1-x^2} \partial_x \right. \\ &\quad \left. + \frac{r_1}{r_2} \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} \right). \end{aligned} \quad (\text{E.43})$$

En calculant les éléments de matrice de cet opérateur avec le potentiel $U_{cn}^{so}(r_1)$ entre les fonctions de Lagrange de la base (7.30), nous obtenons enfin

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{i_1 i_2 k}^{S=0} | U_{cn}^{so}(r_1) (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{s}_1 | \Phi_{i_1' i_2' k'}^{S'=1} \rangle &\approx -\frac{N_{i_1 i_2} N_{i_1' i_2'}}{2} \left(U_{cn}^{so}(hr_{i_1}) \delta_{i_1 i_1'} p_{i_2 i_2'}^N \right. \\ &\quad \left. + U_{cn}^{so}(hr_{i_1}) \delta_{i_1 i_2'} p_{i_2 i_1'}^N + U_{cn}^{so}(hr_{i_2}) \delta_{i_2 i_1'} p_{i_1 i_2'}^N + U_{cn}^{so}(hr_{i_2}) \delta_{i_2 i_2'} p_{i_1 i_1'}^N \right) O_{kk'} \\ &\quad - \frac{1}{4} \delta_{i_1 i_1'} \delta_{i_2 i_2'} \left(U_{cn}^{so}(hr_{i_1}) \frac{r_{i_1}}{r_{i_2}} + U_{cn}^{so}(hr_{i_2}) \frac{r_{i_2}}{r_{i_1}} \right) Q_{kk'} \end{aligned} \quad (\text{E.44})$$

où les éléments de matrice angulaire en x à une dimension $O_{kk'}$ et $Q_{kk'}$ sont évalués exactement afin de préserver l'hermiticité de la matrice hamiltonienne. Ceux-ci s'écrivent

$$O_{kk'} = \sqrt{1-x_k^2} \delta_{kk'} - \frac{(-)^{k+k'}}{2N_x+1} \sqrt{1-x_k^2}, \quad (\text{E.45})$$

et

$$Q_{kk} = \frac{N_x x_k^2 + N_x + 1}{\sqrt{1-x_k^2}} \quad (\text{E.46})$$

lorsque $k = k'$, et

$$Q_{kk'} = (-)^{k+k'} \sqrt{1-x_k^2} \left(\frac{x_k}{x_{k'} - x_k} + \frac{N_x + 1}{2N_x + 1} \right) \quad (\text{E.47})$$

lorsque $k \neq k'$. Les éléments de matrice de la partie spin-orbite de l'interaction cœur-neutron s'obtiennent finalement en combinant les expressions (E.1), (E.40), (E.42) et (E.44).

Annexe F

Systèmes coulombiens à trois corps : opérateurs et éléments de matrice

Nous présentons dans cette annexe les hamiltoniens effectifs correspondants aux états P des systèmes coulombiens à trois corps. Nous donnons également les expressions de certains éléments de matrice.

F.1 Etats P pairs

Dans le cas des états P pairs, la fonction d'onde est donnée par (8.21), et le hamiltonien (8.3) devient

$$H^{(P^e)} = T_S + \frac{1}{2\mu_{12}\rho^2 R^2} \left(\zeta^2 + \frac{R^2}{4} + \rho^2 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) \frac{\zeta}{\rho^2 R} + \frac{1}{2m_3\rho^2} + V_C, \quad (\text{F.1})$$

après avoir intégré sur les angles d'Euler, et où T_S et V_C représentent respectivement l'énergie cinétique des états S (8.4) et le potentiel coulombien (8.5).

F.2 Etats P impairs

La fonction d'onde d'un état P impair prend la forme (8.22). En remplaçant l'expression (8.22) dans l'équation de Schrödinger avec le hamiltonien (8.3) et en intégrant sur les angles d'Euler, nous obtenons le système d'équations suivant

$$\begin{pmatrix} H_{00}^{(P^o)} & H_{01}^{(P^o)} \\ H_{10}^{(P^o)} & H_{11}^{(P^o)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\Phi}_0^{(P^o)} \\ \bar{\Phi}_1^{(P^o)} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \bar{\Phi}_0^{(P^o)} \\ \bar{\Phi}_1^{(P^o)} \end{pmatrix}, \quad (\text{F.2})$$

où les différents opérateurs $H_{ij}^{(P^o)}$ s'écrivent

$$H_{00}^{(P^o)} = T_S + \frac{1}{\mu_{12}R^2} + V_C, \quad (\text{F.3})$$

$$H_{01}^{(P^o)} = \frac{1}{\mu_{12}R^2} \left(\zeta \partial_\rho - \rho \partial_\zeta + \frac{\zeta}{\rho} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) \frac{1}{\rho R} (\rho \partial_\rho + 1), \quad (\text{F.4})$$

$$H_{10}^{(P^o)} = \frac{1}{\mu_{12}R^2} (\rho\partial_\zeta - \zeta\partial_\rho) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) \frac{1}{R} \partial_\rho, \quad (\text{F.5})$$

$$H_{11}^{(P^o)} = T_S + \frac{1}{2\mu_{12}\rho^2 R^2} \left(\zeta^2 + \rho^2 + \frac{R^2}{4} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) \frac{\zeta}{\rho^2 R} + \frac{1}{2m_3\rho^2} + V_C \quad (\text{F.6})$$

où μ_{12} est la masse réduite des particules 1 et 2, et les opérateurs T_S et V_C sont toujours donnés par (8.4) et (8.5).

F.2.1 Cas général

En effectuant le changement de fonctions défini par (8.28), l'équation de Schrödinger devient (8.29). Les éléments de matrice ((8.30)-(8.33)) des opérateurs hamiltoniens $\mathcal{H}_{ij}^{(P^o)}$ dans la base des fonctions de Lagrange (8.34) s'écrivent explicitement

$$\begin{aligned} \langle F_{i'j'k'} | \mathcal{H}_{00}^{(P^o)} | F_{ijk} \rangle &= 2h_x^3 \nu \kappa (\mathcal{N}_{ijk} \mathcal{N}_{i'j'k'})^{-1/2} \\ &\left\{ \delta_{jj'} \delta_{kk'} \sum_{m=1}^{N_x} \lambda_m^x \left[\frac{x_m (\nu y_j + \kappa z_k) (x_m + \nu y_j + \kappa z_k)}{m_1} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{x_m \kappa z_k (\kappa z_k + x_m)}{m_2} + \frac{x_m \nu y_j (x_m + \nu y_j)}{m_3} \right] f_i^{N_{x'}}(x_m) f_{i'}^{N_{x'}}(x_m) \right. \\ &\quad + \nu^{-1} \delta_{ii'} \delta_{kk'} \sum_{p=1}^{N_y} \lambda_p^y \left[\frac{y_p \kappa z_k (\nu y_p + \kappa z_k)}{m_1} \right. \\ &\quad \left. + \frac{y_p (\kappa z_k + x_i) (x_i + \nu y_p + \kappa z_k)}{m_2} + \frac{x_i y_p (x_i + \nu y_p)}{m_3} \right] f_j^{N_{y'}}(y_p) f_{j'}^{N_{y'}}(y_p) \\ &\quad + \kappa^{-1} \delta_{ii'} \delta_{jj'} \sum_{q=1}^{N_z} \lambda_q^z \left[\frac{\nu y_j z_q (\nu y_j + \kappa z_q)}{m_1} \right. \\ &\quad \left. + \frac{x_i z_q (\kappa z_q + x_i)}{m_2} + \frac{z_q (x_i + \nu y_j) (x_i + \nu y_j + \kappa z_q)}{m_3} \right] f_k^{N_{z'}}(z_q) f_{k'}^{N_{z'}}(z_q) \\ &\quad - \delta_{ii'} \left[(\lambda_j^y \lambda_{k'}^z)^{-1/2} \frac{y_j z_{k'} (\nu y_j + \kappa z_{k'})}{m_1} f_{j'}^{N_{y'}}(y_j) f_k^{N_{z'}}(z_{k'}) \right. \\ &\quad \left. + (\lambda_{j'}^y \lambda_k^z)^{-1/2} \frac{y_{j'} z_k (\nu y_{j'} + \kappa z_k)}{m_1} f_j^{N_{y'}}(y_{j'}) f_{k'}^{N_{z'}}(z_k) \right] \\ &\quad - \delta_{jj'} \left[(\lambda_i^x \lambda_{k'}^z)^{-1/2} \frac{x_i z_{k'} (\kappa z_{k'} + x_i)}{m_2} f_{i'}^{N_{x'}}(x_i) f_k^{N_{z'}}(z_{k'}) \right. \\ &\quad \left. + (\lambda_{i'}^x \lambda_k^z)^{-1/2} \frac{x_{i'} z_k (\kappa z_k + x_{i'})}{m_2} f_i^{N_{x'}}(x_{i'}) f_{k'}^{N_{z'}}(z_k) \right] \\ &\quad - \delta_{kk'} \left[(\lambda_i^x \lambda_{j'}^y)^{-1/2} \frac{x_i y_{j'} (x_i + \nu y_{j'})}{m_3} f_{i'}^{N_{x'}}(x_i) f_{j'}^{N_{y'}}(y_{j'}) \right. \\ &\quad \left. + (\lambda_{i'}^x \lambda_j^y)^{-1/2} \frac{x_{i'} y_j (x_{i'} + \nu y_j)}{m_3} f_i^{N_{x'}}(x_{i'}) f_{j'}^{N_{y'}}(y_j) \right] \left. \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +h_x^{-1}\delta_{ii'}\delta_{jj'}\delta_{kk'} \left[\frac{2Z_1Z_2}{x_i + \nu y_j} + \frac{2Z_2Z_3}{\nu y_j + \kappa z_k} + \frac{2Z_3Z_1}{\kappa z_k + x_i} \right. \\
& \left. + \frac{4}{h_x^2\mu_{12}(x_i + \nu y_j)^2} \right], \tag{F.7}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle F_{i'j'k'} | \mathcal{H}_{01}^{(P^o)} | F_{ijk} \rangle &= 2h_x^3\nu\kappa(\mathcal{N}_{ijk}\mathcal{N}_{i'j'k'})^{-1/2} \\
& \left\{ \delta_{ii'}\delta_{jj'} \left[\lambda_{k'}^{z-1/2} \frac{x_{i'}y_{j'}z_{k'}(x_{i'} + \nu y_{j'} + \kappa z_{k'})}{x_{i'} + \nu y_{j'}} \right. \right. \\
& \left[\frac{x_{i'} + \kappa z_{k'}}{m_2} - \frac{\nu y_{j'} + \kappa z_{k'}}{m_1} \right] f_k^{N_{z'}}(z_{k'}) \\
& + \lambda_k^{z-1/2} \frac{x_i y_j z_k (x_i + \nu y_j + \kappa z_k)}{x_i + \nu y_j} \\
& \left. \left[\frac{\nu y_j + \kappa z_k}{m_1} - \frac{x_i + \kappa z_k}{m_2} \right] f_{k'}^{N_{z'}}(z_k) \right] \\
& - \delta_{jj'}\delta_{kk'} \left[\lambda_{i'}^{x-1/2} \frac{x_{i'}y_{j'}z_{k'}(x_{i'} + \nu y_{j'} + \kappa z_{k'})}{x_{i'} + \nu y_{j'}} \right. \\
& \left[\frac{\nu y_{j'} + \kappa z_{k'}}{m_1} + \frac{x_{i'} + \kappa z_{k'}}{m_2} \right] f_i^{N_{x'}}(x_{i'}) \\
& - \lambda_i^{x-1/2} \frac{x_i y_j z_k (x_i + \nu y_j + \kappa z_k)}{x_i + \nu y_j} \\
& \left. \left[\frac{\nu y_j + \kappa z_k}{m_1} + \frac{x_i + \kappa z_k}{m_2} \right] f_{i'}^{N_{x'}}(x_i) \right] \\
& + \delta_{ii'}\delta_{kk'} \left[\lambda_{j'}^{y-1/2} \frac{x_{i'}y_{j'}z_{k'}(x_{i'} + \nu y_{j'} + \kappa z_{k'})}{x_{i'} + \nu y_{j'}} \right. \\
& \left[\frac{\nu y_{j'} + \kappa z_{k'}}{m_1} + \frac{x_{i'} + \kappa z_{k'}}{m_2} \right] f_j^{N_{y'}}(y_{j'}) \\
& - \lambda_j^{y-1/2} \frac{x_i y_j z_k (x_i + \nu y_j + \kappa z_k)}{x_i + \nu y_j} \\
& \left. \left[\frac{\nu y_j + \kappa z_k}{m_1} + \frac{x_i + \kappa z_k}{m_2} \right] f_{j'}^{N_{y'}}(y_j) \right] \Big\} \\
& + 2\delta_{ii'}\delta_{jj'}\delta_{kk'} \left[\frac{\kappa x_i z_k - \nu \kappa y_j z_k - \nu^2 y_j^2 - \nu x_i y_j}{m_1} \right. \\
& \left. + \frac{\kappa x_i z_k - \nu \kappa y_j z_k + x_i^2 + \nu x_i y_j}{m_2} \right] \frac{1}{(x_i + \nu y_j)^2}, \tag{F.8}
\end{aligned}$$

où nous utilisons les notations $\nu = h_y/h_x$ et $\kappa = h_z/h_x$ pour les facteurs d'échelle. Les éléments de matrice de $\mathcal{H}_{11}^{(P^o)}$ entre fonctions de base de Lagrange sont très semblables à ceux de $\mathcal{H}_{00}^{(P^o)}$, la seule différence provenant du carré du facteur de régularisation \mathcal{R} (voir les expressions (8.30) et (8.33)).

F.2.2 Systèmes atomiques à 3 corps dont deux sont identiques

Dans certains cas tels que l'atome d'hélium, il est possible d'accélérer la convergence en utilisant une transformation particulière des fonctions $\bar{\Phi}_0^{(P^o)}$ et $\bar{\Phi}_1^{(P^o)}$

$$\begin{aligned}\bar{\Phi}_0^{(P^o)}(R, \rho, \zeta) &= \left(\zeta + \frac{R}{2}\right) \tilde{\Phi}_0^{(P^o)}(R, \rho, \zeta) + \left(\zeta - \frac{R}{2}\right) \tilde{\Phi}_1^{(P^o)}(R, \rho, \zeta), \\ \bar{\Phi}_1^{(P^o)}(R, \rho, \zeta) &= \rho \tilde{\Phi}_0^{(P^o)}(R, \rho, \zeta) + \rho \tilde{\Phi}_1^{(P^o)}(R, \rho, \zeta).\end{aligned}\quad (\text{F.9})$$

Cette transformation est suggérée par une analyse de la fonction d'onde P^o au moyen de fonctions de type hydrogénoïde [Gré97]. Ce choix est particulièrement utile lorsque deux des trois particules sont identiques. Avec ce choix des fonctions $\bar{\Phi}_K^{(P^o)}$, l'équation de Schrödinger peut se mettre, après intégration sur les angles d'Euler, sous la forme du système matriciel suivant

$$\begin{pmatrix} \widetilde{H}_{00}^{(P^o)} & \widetilde{H}_{01}^{(P^o)} \\ \widetilde{H}_{10}^{(P^o)} & \widetilde{H}_{11}^{(P^o)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\Phi}_0^{(P^o)} \\ \tilde{\Phi}_1^{(P^o)} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \widetilde{M}_{00} & \widetilde{M}_{01} \\ \widetilde{M}_{10} & \widetilde{M}_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\Phi}_0^{(P^o)} \\ \tilde{\Phi}_1^{(P^o)} \end{pmatrix}. \quad (\text{F.10})$$

Les opérateurs hamiltoniens $\widetilde{H}_{ij}^{(P^o)}$ sont donnés explicitement par

$$\begin{aligned}\widetilde{H}_{00}^{(P^o)} &= \left[\left(\zeta + \frac{R}{2}\right)^2 + \rho^2 \right] (T_S + V_C) - \frac{1}{m_3} \left[\left(\zeta + \frac{R}{2}\right) \partial_\zeta + \rho \partial_\rho \right] \\ &\quad + \frac{1}{m_1} \left[- \left(\zeta + \frac{R}{2}\right) \partial_R - \left(\frac{R}{4} + \frac{\zeta}{2} + \frac{\rho^2}{R}\right) \partial_\zeta + \frac{\zeta - \frac{R}{2}}{R} \rho \partial_\rho \right],\end{aligned}\quad (\text{F.11})$$

$$\begin{aligned}\widetilde{H}_{01}^{(P^o)} &= \left[\zeta^2 - \frac{R^2}{4} + \rho^2 \right] (T_S + V_C) - \frac{1}{m_3} \left[\left(\zeta + \frac{R}{2}\right) \partial_\zeta + \rho \partial_\rho \right] \\ &\quad + \frac{1}{m_2} \left[\left(\zeta + \frac{R}{2}\right) \partial_R - \left(\frac{R}{4} + \frac{\zeta}{2} - \frac{\rho^2}{R}\right) \partial_\zeta - \frac{\zeta + \frac{R}{2}}{R} \rho \partial_\rho \right],\end{aligned}\quad (\text{F.12})$$

$$\begin{aligned}\widetilde{H}_{10}^{(P^o)} &= \left[\zeta^2 - \frac{R^2}{4} + \rho^2 \right] (T_S + V_C) - \frac{1}{m_3} \left[\left(\zeta - \frac{R}{2}\right) \partial_\zeta + \rho \partial_\rho \right] \\ &\quad + \frac{1}{m_1} \left[\left(-\zeta + \frac{R}{2}\right) \partial_R + \left(\frac{R}{4} - \frac{\zeta}{2} - \frac{\rho^2}{R}\right) \partial_\zeta + \frac{\zeta - \frac{R}{2}}{R} \rho \partial_\rho \right],\end{aligned}\quad (\text{F.13})$$

$$\begin{aligned}\widetilde{H}_{11}^{(P^o)} &= \left[\left(\zeta - \frac{R}{2}\right)^2 + \rho^2 \right] (T_S + V_C) - \frac{1}{m_3} \left[\left(\zeta - \frac{R}{2}\right) \partial_\zeta + \rho \partial_\rho \right] \\ &\quad + \frac{1}{m_2} \left[\left(\zeta - \frac{R}{2}\right) \partial_R + \left(\frac{R}{4} - \frac{\zeta}{2} + \frac{\rho^2}{R}\right) \partial_\zeta - \frac{\zeta + \frac{R}{2}}{R} \rho \partial_\rho \right],\end{aligned}\quad (\text{F.14})$$

et les éléments de la matrice de norme valent

$$\widetilde{M}_{00} = \left(\zeta + \frac{R}{2}\right)^2 + \rho^2, \quad (\text{F.15})$$

$$\widetilde{M}_{01} = \widetilde{M}_{10} = \zeta^2 - \frac{R^2}{4} + \rho^2, \quad (\text{F.16})$$

$$\widetilde{M}_{11} = \left(\zeta - \frac{R}{2}\right)^2 + \rho^2. \quad (\text{F.17})$$

Exprimés en coordonnées périmétriques à l'aide des relations (8.7) les éléments de la matrice de norme s'écrivent (à un facteur 4 près)

$$M_{00} = (x+z)^2, \quad (\text{F.18})$$

$$M_{01} = M_{10} = xz + yz + z^2 - xy, \quad (\text{F.19})$$

$$M_{11} = (y+z)^2, \quad (\text{F.20})$$

et les éléments de matrice des opérateurs hamiltoniens $H_{ij}^{(P^o)}$ pris entre deux fonctions F et G deviennent (également à un facteur 4 près)

$$\langle F | \mathcal{H}_{00} | G \rangle = \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \int_0^\infty dz (x+z)^2 [\mathcal{T}(F, G) + \mathcal{V}(F, G)], \quad (\text{F.21})$$

$$\begin{aligned} \langle F | \mathcal{H}_{01} | G \rangle &= \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \int_0^\infty dz (xz + yz + z^2 - xy) [\mathcal{T}(F, G) + \mathcal{V}(F, G)] \\ &+ \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \int_0^\infty dz \left\{ \frac{2}{m_1} (y+z) \left[yz(2x+y+z) F \partial_z G \right. \right. \\ &+ x(z-y)(x+y+z) F \partial_x G - yz(2x+y+z) F \partial_y G \left. \right] \\ &+ \frac{2}{m_2} (x+z) \left[xz(x+2y+z) F \partial_x G \right. \\ &- y(z-x)(x+y+z) F \partial_y G - xz(x+2y+z) F \partial_z G \left. \right] \\ &+ \frac{2}{m_3} (x+y) \left[-xy(x+y+2z) F \partial_x G \right. \\ &+ xy(x+y+2z) F \partial_y G + z(y-x)(x+y+z) F \partial_z G \left. \right] \left. \right\}, \quad (\text{F.22}) \end{aligned}$$

$$\langle F | \mathcal{H}_{10} | G \rangle = \langle G | \mathcal{H}_{01} | F \rangle, \quad (\text{F.23})$$

$$\langle F | \mathcal{H}_{11} | G \rangle = \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \int_0^\infty dz (y+z)^2 [\mathcal{T}(F, G) + \mathcal{V}(F, G)]. \quad (\text{F.24})$$

Les expressions de ces éléments de matrice lorsque les fonctions F et G sont des fonctions de Lagrange (8.34) ont une forme similaire à celles des états S et P vues précédemment ((6.45), (F.7) et (F.8)).

Dans le cas de systèmes à trois corps comprenant deux particules identiques, soient 1 et 2, le système d'équations (F.10) peut être simplifié en prenant en compte la symétrie d'échange des particules identiques dans la fonction d'onde. A partir des définitions (6.21) et (8.7) des coordonnées, nous constatons que la permutation des particules 1 et 2 revient à changer le signe de la variable ζ . Avec le choix (F.9) des fonctions d'onde, nous pouvons alors construire les fonctions d'onde symétriques et antisymétriques pour les états P impairs (8.22) en prenant

$$\tilde{\Phi}_1^{(P^o)}(R, \rho, \zeta) = \pm P_{12} \tilde{\Phi}_0^{(P^o)}(R, \rho, \zeta) = \pm \tilde{\Phi}_0^{(P^o)}(R, \rho, -\zeta) \quad (\text{F.25})$$

à l'aide de l'opérateur de permutation P_{12} , et où le signe $+$ ($-$) correspond aux fonctions symétriques (antisymétriques). Le système matriciel (F.10) exprimé en coordonnées périmétriques peut dans ce cas se réécrire

$$\left(\begin{array}{cc} \mathcal{H}_{00}^{(P^o)} & \mathcal{H}_{01}^{(P^o)} \\ P_{12} \mathcal{H}_{01}^{(P^o)} P_{12} & P_{12} \mathcal{H}_{00}^{(P^o)} P_{12} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} \Phi_0^{(P^o)} \\ \pm P_{12} \Phi_0^{(P^o)} \end{array} \right)$$

$$= E \begin{pmatrix} M_{00} & M_{01} \\ P_{12}M_{01}P_{12} & P_{12}M_{00}P_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_0^{(P^o)} \\ \pm P_{12}\Phi_0^{(P^o)} \end{pmatrix} \quad (\text{F.26})$$

étant donnée la symétrie des opérateurs hamiltoniens et de norme vis-à-vis de la permutation des coordonnées périmétriques x et y . Les deux équations de ce système sont alors équivalentes, et nous pouvons n'en conserver qu'une, qui s'écrit en explicitant la dépendance en les coordonnées périmétriques

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{00}^{(P^o)}\Phi_0^{(P^o)}(x, y, z) \pm \mathcal{H}_{01}^{(P^o)}\Phi_0^{(P^o)}(y, x, z) \\ = E(M_{00}\Phi_0^{(P^o)}(x, y, z) \pm M_{01}\Phi_0^{(P^o)}(y, x, z)). \end{aligned} \quad (\text{F.27})$$

F.2.3 Problème généralisé

La détermination des états P impairs avec le système (F.10) nécessite la résolution d'un problème généralisé puisque la matrice de norme \widetilde{M} (ou M en coordonnées périmétriques) est différente de la matrice identité. Cependant dans la base des fonctions de Lagrange (8.34), la matrice M , ne contenant que des opérateurs multiplicatifs, prend la forme d'une matrice symétrique tridiagonale. Il est alors possible de dégénéraliser le problème matriciel en utilisant l'algorithme de Choleski [Jen77]. La matrice de norme est ainsi décomposée en un produit de deux matrices triangulaires, transposées l'une de l'autre, et la matrice hamiltonienne est ensuite multipliée à gauche et à droite par les inverses de ces matrices. La matrice de norme peut donc se mettre sous la forme

$$M = {}^tT T \quad (\text{F.28})$$

où la matrice triangulaire supérieure T s'écrit

$$T = \begin{pmatrix} T_{00} & T_{01} \\ 0 & T_{11} \end{pmatrix}. \quad (\text{F.29})$$

Les éléments de matrice de T dans la base des fonctions de Lagrange (8.34) s'expriment en fonction des éléments de matrice de la matrice de norme M

$$\begin{cases} T_{00}^{II} = \sqrt{M_{00}^{II}} \\ T_{01}^{II} = \frac{M_{01}^{II}}{\sqrt{M_{00}^{II}}} \\ T_{11}^{II} = \sqrt{\frac{M_{11}^{II}M_{00}^{II} - (M_{01}^{II})^2}{M_{00}^{II}}} \end{cases} \quad (\text{F.30})$$

où les exposants I identifient les triplets (ijk) correspondant aux fonctions de Lagrange (8.34).

La matrice T ainsi formée est facilement inversible, et le système matriciel (F.10) en coordonnées périmétriques se réécrit

$$\begin{pmatrix} d\mathcal{H}_{00}^{(P^o)} & d\mathcal{H}_{01}^{(P^o)} \\ d\mathcal{H}_{10}^{(P^o)} & d\mathcal{H}_{11}^{(P^o)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\Phi_0^{(P^o)} \\ d\Phi_1^{(P^o)} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} d\Phi_0^{(P^o)} \\ d\Phi_1^{(P^o)} \end{pmatrix} \quad (\text{F.31})$$

où la matrice hamiltonienne ${}^d\mathcal{H}^{(P^o)}$ du système dégénéralisé est donnée par

$${}^d\mathcal{H}^{(P^o)} = ({}^tT)^{-1}\mathcal{H}^{(P^o)}T^{-1} \quad (\text{F.32})$$

et les fonctions dégénéralisées sont définies par

$${}^d\Phi^{(P^o)} = T\Phi^{(P^o)}. \quad (\text{F.33})$$

Bibliographie

- [ABW97] G Audi, O Bersillon, J Blachot et A H Wapstra, *Nucl. Phys. A* **624** (1997), 1.
- [Ajz84] F Ajzenberg-Selove, *Nucl. Phys. A* **413** (1984), 1.
- [AM88] S A Alexander et H J Monkhorst, *Phys. Rev. A* **38** (1988), 26.
- [AS65] M Abramowitz et I A Stegun, *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables*, Dover, New York, 1965.
- [AW93] G Audi et A H Wapstra, *Nucl. Phys. A* **565** (1993), 1.
- [Bar95] S Bartholome, *Travail de fin d'études, Applications de méthodes sur réseaux à la diffusion par un potentiel*, Université Libre de Bruxelles, 1995.
- [Bay94] D Baye, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **27** (1994), L187.
- [Bay95] D Baye, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **28** (1995), 4399.
- [Bay97] D Baye, *Nucl. Phys. A* **627** (1997), 305.
- [BB52] J M Blatt et L C Biedenharn, *Rev. Mod. Phys.* **24** (1952), 258.
- [BB54] L C Biedenharn et J M Blatt, *Phys. Rev.* **93** (1954), 1387.
- [BB00] D Baye et E Brainin, *Phys. Rev. C* **61** (2000), 025801.
- [Bet49] H A Bethe, *Phys. Rev.* **76** (1949), 38.
- [BH86] D Baye et P-H Heenen, *J. Phys. A : Math. Gen.* **19** (1986), 2041.
- [Bha70] A K Bhatia, *Phys. Rev. A* **2** (1970), 1667.
- [BHK00] D Baye, M Hesse et R Kamouni, *Phys. Rev. C* **63** (2000), 014605.
- [BHSV98] D Baye, M Hesse, J-M Sparenberg et M Vincke, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **31** (1998), 3439.
- [BJ49] J M Blatt et J D Jackson, *Phys. Rev.* **76** (1949), 18.
- [BKV94] D Baye, M Kruglanski et M Vincke, *Nucl. Phys. A* **573** (1994), 431.
- [BL86] Z Bačić et J C Light, *J. Chem. Phys.* **85** (1986), 4594.
- [Blo57] C Bloch, *Nucl. Phys.* **4** (1957), 503.
- [BN00] M Bylicki et C A Nicolaides, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **33** (2000), 911.
- [BR75] P G Burke et W D Robb, *Adv. At. Mol. Phys.* **11** (1975), 143.

- [BRT83] R F Barrett, B A Robson et W Tobocman, *Rev. Mod. Phys.* **55** (1983), 155.
- [BS57] H A Bethe et E E Salpeter, *Quantum mechanics of one- and two-electron atoms*, Springer, Berlin, 1957.
- [BS85] R Blackmore et B Shizgal, *Phys. Rev. A* **31** (1985), 1855.
- [BS98] F Brau et C Semay, *J. Comput. Phys.* **139** (1998), 127.
- [BV91] D Baye et M Vincke, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **24** (1991), 3551.
- [BV99] D Baye et M Vincke, *Phys. Rev. E* **59** (1999), 7195.
- [CDL73] C Cohen-Tannoudji, B Diu et F Laloë, *Mécanique quantique*, Hermann, Paris, 1973.
- [Chu90] S-I Chu, *Chem. Phys. Lett.* **167** (1990), 155.
- [CL92a] G C Corey et D Lemoine, *J. Chem. Phys.* **97** (1992), 4115.
- [CL92b] A Csöto et R G Lovas, *Phys. Rev. C* **46** (1992), 576.
- [CM92] D T Colbert et W H Miller, *J. Chem. Phys.* **96** (1992), 1982.
- [CPV01] O Chuluunbaatar, I V Puzynin et S I Vinitzky, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **34** (2001), L425.
- [CT95] G C Corey et J W Tromp, *J. Chem. Phys.* **103** (1995), 1812.
- [CXS93] R Chen, Z Xu et L Sun, *Phys. Rev. E* **47** (1993), 3799.
- [DC68] A S Dickinson et P R Certain, *J. Chem. Phys.* **49** (1968), 4209.
- [Dra96] G W F Drake, *Atomic, molecular and optical physics handbook*, AIP, New York, 1996.
- [End67] P F Endres, *J. Chem. Phys.* **47** (1967), 798.
- [Euv94] D Euvrard, *Résolution numérique des équations aux dérivées partielles*, Masson, Paris, 1994.
- [FBK96] E Fattal, R Baer et R Kosloff, *Phys. Rev. E* **53** (1996), 1217.
- [Fea84] J M Feagin, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **17** (1984), 2433.
- [Flü71] S Flüge, *Practical quantum mechanics*, Vol. 1, Springer, Berlin, 1971.
- [Fri85] R A Friesner, *Chem. Phys. Lett.* **116** (1985), 39.
- [Fro98a] A M Frolov, *Phys. Rev. A* **58** (1998), 4479.
- [Fro98b] A M Frolov, *Phys. Rev. A* **57** (1998), 2436.
- [Fro99a] A M Frolov, *Phys. Rev. A* **60** (1999), 2834.
- [Fro99b] A M Frolov, *Phys. Rev. A* **59** (1999), 4270.
- [Ful94] L P Fulcher, *Phys. Rev. D* **50** (1994), 447.
- [Gau94] W Gautschi, *ACM Trans. Math. Softw.* **20** (1994), 21.
- [GB74] T L Gilbert et P J Bertoncini, *J. Chem. Phys.* **61** (1974), 3026.
- [GLH89] M Godefroid, J Liévin et P-H Heenen, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22** (1989), 3119.

- [Glö83] W Glöcke, *The quantum mechanical few-body problem*, Springer, Berlin, 1983.
- [GO77] D Gottlieb et S A Orszag, *Numerical analysis of spectral methods : theory and applications*, SIAM, Philadelphia, 1977.
- [Gré97] B Grémaud, *Thèse de doctorat, Problème coulombien à trois corps en mécanique quantique*, Université Paris 6, 1997.
- [GWLH91] D Z Goodson, D K Watson, J G Loeser et D R Herschbach, *Phys. Rev. A* **44** (1991), 97.
- [HB59] M H Hull et G Breit, *Nuclear reactions II : Theory, Encyclopedia of physics*, Springer, Berlin, 1959.
- [HB99] M Hesse et D Baye, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **32** (1999), 5605.
- [HB01] M Hesse et D Baye, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **34** (2001), 1425.
- [HBS99] M Hesse, D Baye et J-M Sparenberg, *Phys. Lett. B* **455** (1999), 1.
- [HEG65] D O Harris, G G Engerholm et W D Gwinn, *J. Chem. Phys.* **43** (1965), 1515.
- [Her50] G Herzberg, *Molecular spectra and molecular structure*, Vol. 1, Van Nostrand, New Jersey, 1950.
- [HL83] R W Heather et J C Light, *J. Chem. Phys.* **79** (1983), 147.
- [HMS88] S E Haywood, H J Monkhorst et K Szalewicz, *Phys. Rev. A* **37** (1988), 3393.
- [Ho83] Y K Ho, *Phys. Rep.* **99** (1983), 1.
- [Ho90] Y K Ho, *Phys. Lett. A* **144** (1990), 237.
- [HOT73] J Hamilton, I Overbö et B Tromborg, *Nucl. Phys. B* **60** (1973), 443.
- [HR95] G G Hall et D Rees, *Intern. J. Quant. Chem* **53** (1995), 189.
- [HSvRB98] M Hesse, J-M Sparenberg, F van Raemdonck et D Baye, *Nucl. Phys. A* **640** (1998), 37.
- [HTB84] M Hanck, Y C Tang et D Baye, *Nucl. Phys. A* **419** (1984), 308.
- [Hum85] J Humblet, *J. Math. Phys.* **26** (1985), 656.
- [Jen77] A Jennings, *Matrix computation for engineers and scientists*, Wiley, London, 1977.
- [JOS86] S Jacobs, M G Olsson et C Suchyta III, *Phys. Rev. D* **33** (1986), 3338.
- [KKNN79] H Kanada, T Kaneko, S Nagata et M Nomoto, *Prog. Theor. Phys.* **61** (1979), 1327.
- [KNOS83] V I Kukulin, V G Neudatchin, I T Obukhovski et Y F Smirnov, *Clusters as subsystems in light nuclei*, dans *Clustering phenomena in nuclei*, Vol. 3, (éditeurs K. Wildermuth et P Kramer), Vieweg, Braunschweig, 1983.

- [Kos88] R Kosloff, *J. Phys. Chem.* **92** (1988), 2087.
- [Kry62] V I Krylov, *Approximate calculation of integrals*, Macmillan, New York, 1962.
- [KS97a] H Karabulut et E L Sibert III, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **30** (1997), 513.
- [KS97b] H Karabulut et E L Sibert III, *J. Math. Phys.* **38** (1997), 4815.
- [Lan94] K Langanke, dans *Advances in nuclear physics*, (éditeurs J W Negel et E Vogt), Plenum, New York, 1994.
- [Lay93] E G Layton, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **26** (1993), 2501.
- [Lef91] C Leforestier, *J. Chem. Phys.* **94** (1991), 6388.
- [Lem94a] D Lemoine, *Chem. Phys. Lett.* **224** (1994), 483.
- [Lem94b] D Lemoine, *J. Chem. Phys.* **101** (1994), 3936.
- [LHL85] J.C. Light, I P Hamilton et J V Lill, *J. Chem. Phys.* **82** (1985), 1400.
- [Lig92] J C Light, dans *Time-dependent quantum molecular dynamics*, (éditeurs J Broeckhove et L Lathouwers), Plenum, New York, p. 185, 1992.
- [LLR⁺80] M Lacombe, B Loiseau, J M Richard, R Vinh Mau, J Côté, P Pirès et R de Tourreil, *Phys. Rev. C* **21** (1980), 861.
- [LPL82] J V Lill, G A Parker et J C Light, *Chem. Phys. Lett.* **89** (1982), 483.
- [LS93] E G Layton et E Stade, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **26** (1993), L489.
- [LT58] A M Lane et R G Thomas, *Rev. Mod. Phys.* **30** (1958), 257.
- [Mal94] L Malegat, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **27** (1994), L691.
- [MB89] C C Marston et G G Balint-Kurti, *J. Chem. Phys.* **91** (1989), 3571.
- [Mel93] V S Melezhik, *Phys. Rev. A* **48** (1993), 4528.
- [Mel97] V S Melezhik, *Phys. Lett. A* **230** (1997), 203.
- [Mes59] A Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod, Paris, 1959.
- [MF53] P M Morse et H Feshbach, *Methods of theoretical physics*, vol II, McGraw-Hill, New York, 1953.
- [MFHB00] J D Mancini, V Fessatidis, Q Haider et S P Bowen, *Phys. Lett. A* **274** (2000), 170.
- [MHE87] R Machleidt, R Holinde et C Elster, *Phys. Rep.* **149** (1987), 1.
- [MJ57] M G Mayer et J H D Jensen, *Elementary theory of nuclear shell structure*, Wiley, London, 1957.
- [MM81] T Meis et U Marcowitz, *Numerical solutions of partial differential equations*, Springer, Berlin, 1981.
- [Mos99] R E Moss, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **32** (1999), L89.

- [Muc90] J T Muckerman, *Chem. Phys. Lett.* **173** (1990), 200.
- [MV94] L Malegat et M Vincke, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **27** (1994), 645.
- [MW88] D E Manolopoulos et R E Wyatt, *Chem. Phys. Lett.* **152** (1988), 23.
- [New82] R G Newton, *Scattering theory of waves and particles*, Springer, New York, 1982.
- [NO76] A Nikiforov et V Ouvarov, *Eléments de la théorie des fonctions spéciales*, Mir, Moscou, 1976.
- [Nus82] H J Nussbaumer, *Fast fourier transform and convolution algorithms*, Springer, Berlin, 1982.
- [PB75] M A Preston et R K Bhaduri, *Structure of the nucleus*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1975.
- [Pek58] C L Pekeris, *Phys. Rev.* **112** (1958), 1649.
- [Pre75] P M Prenter, *Splines and variational methods*, Wiley, New York, 1975.
- [Ray81] J Raynal, dans *Computing as a language of physics*, Trieste, 1971, (IAEA, Vienne, 1972) p. 281.
- [RJ68] R V Reid Jr., *Ann. Phys. (NY)* **50** (1968), 411.
- [Ron90] A Ronveaux, *Physicalia Mag.* **12** (1990), 23.
- [Ros61] M E Rose, *Elementary theory of angular momentum*, Wiley, New York, 1961.
- [SAGM00] H Suno, L Andric, T P Grozdanov et R McCarroll, *Phys. Lett. A* **265** (2000), 377.
- [SB51] E E Salpeter et H A Bethe, *Phys. Rev.* **84** (1951), 1232.
- [SB84] C Shizgal et R Blackmore, *J. Comput. Phys.* **55** (1984), 313.
- [SBHS01] C Semay, D Baye, M Hesse et B Silvestre-Brac, *Phys. Rev. E* **64** (2001), 016703.
- [Sch85] C Schwartz, *J. Math. Phys.* **26** (1985), 411.
- [Sch97] B I Schneider, *Phys. Rev. A* **55** (1997), 3417.
- [Sem00] C Semay, *Phys. Rev. E* **62** (2000), 8777.
- [SF94] A Stathopoulos et C F Fisher, *Comput. Phys. Commun.* **79** (1994), 268.
- [Sho73] B W Shore, *J. Chem. Phys.* **58** (1973), 3855.
- [Sob79] I I Sobelman, *Atomic spectra and radiative transitions*, Springer, Berlin, 1979.
- [SS66] A H Stroud et D Secret, *Gaussian quadrature formulas*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1966.
- [SUV98] Y Suzuki, J Usukura et K Varga, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **31** (1998), 31.

- [SYM57] H P Stapp, T J Ypsilantis et N Metropolis, *Phys. Rev.* **105** (1957), 302.
- [Sza96] V Szalay, *J. Chem. Phys.* **105** (1996), 6940.
- [Tei51] T Teichmann, *Phys. Rev.* **83** (1951), 141.
- [vD89] W van Dijk, *Phys. Rev. C* **40** (1989), 1437.
- [vDK92] W van Dijk et M W Kermode, *Phys. Rev. C* **45** (1992), 1528.
- [vH77] H van Haeringen, *J. Math. Phys.* **18** (1977), 927.
- [VMB93] M Vincke, L Malegat et D Baye, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **26** (1993), 811.
- [VMK88] D A Varshalovich, A N Moskalev et V K Khersonskii, *Quantum theory of angular momentum*, World Scientific, Singapour, 1988.
- [Wei99] G W Wei, *J. Chem. Phys.* **110** (1999), 8930.
- [Wei00] G W Wei, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **33** (2000), 343.
- [Wig59] E P Wigner, *Group theory and its application of the quantum mechanics of atomic spectra*, Academic press, New York, 1959.
- [WMU92] R V Weaver, J T Muckerman et T Uzer, dans *Time-dependent quantum molecular dynamics*, (éditeurs J Broeckhove et L Lathouwers), Plenum, New York, p. 381, 1992.
- [WT77] K Wildermuth et Y C Tang, *A unified theory of the nucleus*, Vieweg, Braunschweig, 1977.
- [Yam54] Y Yamaguchi, *Phys. Rev.* **95** (1954), 1628.
- [YBL78] R Yaris, J Bendler et R A Lovett, *Phys. Rev. A* **18** (1978), 1816.
- [YC92] G Yao et S-I Chu, *Phys. Rev. A* **45** (1992), 6735.
- [YP88] W Yang et A Peet, *Chem. Phys. Lett.* **153** (1988), 98.
- [ZDF⁺93] M V Zhukov, B V Danilin, D V Fedorov, J M Bang, I J Thompson et J S Vaagen, *Phys. Rep.* **231** (1993), 151.
- [Zhe90] Z Zhen, *Phys. Rev. A* **41** (1990), 87.