

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



N° d'ordre :

UNIVERSITE FERHAT ABBAS SETIF 1
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



Série:

THESE

Présenté pour obtenir le diplôme de

DOCTORAT LMD

Spécialité : Physique

Option : Physique Théorique

Par

YOSRA REDJATI

THEME

Méthode semi-classique appliquée aux systèmes *Fermioniques* :

Du noyau atomique aux systèmes quantiques en dimensions réduites

Soutenue le: 13 / 09 / 2020

Devant le jury

Président :	M. Maamache	Prof.	UFA. Setif1
Rapporteur :	K. Berkane	MCA.	UFA. Setif1
Examineurs :	N. Mebarki	Prof.	UFA. Constantine
	S. Lamari	Prof.	UFA. Setif1
Invité :	K. Bencheikh	Prof.	UFA. Setif1

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE FERHAT ABBAS SETIF 1
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



Sujet
Thèse

Présenté pour obtenir le diplôme de

DOCTORAT

Spécialité : Physique

Option : Physique Théorique

Par

YOSRA REDJATI

THEME

Méthode semi-classique appliquée aux systèmes fermioniques :

Du noyau atomique aux systèmes quantiques en dimensions réduites

Soutenu le : 13/09/2020

Devant le jury

<i>Président</i>	<i>M. Maamache</i>	<i>Prof.</i>	<i>UFA.</i>	<i>Setif1</i>
<i>Rapporteur</i>	<i>K. Berkane</i>	<i>MCA.</i>	<i>UFA.</i>	<i>Setif1</i>
<i>Examineurs</i>	<i>N. Mebarki</i>	<i>Prof.</i>	<i>UFA.</i>	<i>Constantine</i>
	<i>S. Lamari</i>	<i>Prof.</i>	<i>UFA.</i>	<i>Setif1</i>
<i>Invité</i>	<i>K. Bencheikh</i>	<i>Prof.</i>	<i>UFA.</i>	<i>Setif1</i>

Remerciements

Avant tout je remercie Dieu le tout puissant de m'avoir donné la santé, la patience, la volonté et l'aide durant toute ma vie.

Ce travail a été réalisé au sein de l'équipe 3 (système quantique en dimension réduite) du laboratoire de physique quantique et systèmes dynamiques de l'université Ferhat Abbas Sétif1.

Je tiens avant tous, à exprimer ma profonde gratitude à Madame Karima Berkane, professeur à l'université de Sétif, mon encadreur, qui a assumée à la direction de ce travail. Quel'elle veuille bien trouver ici l'expression de ma reconnaissance pour son dévouement, sa patience, sa disponibilité, ses conseils et sa gentillesse tout au long de ce travail.

Je remercie également le professeur Kamel Bencheikh de l'université de Sétif pour sa contribution dans la réalisation de ce travail.

Je remercie sincèrement le Professeur Mustapha Maamache pour l'honneur qu'il ma fait en acceptant de présider le jury.

Je remercie également tous les membres de jury, Monsieur Nouredinne Mebarki Professeur à l'université de Constantine et Monsieur Saadi Lamari Professeur à l'université de Sétif 1, qui ont accepté d'examiner ma thèse de doctorat.

Je n'oublierai pas de remercier tous les enseignants qui, par leurs enseignements, leur encouragement et leur aide, ont contribué à ma formation durant toutes les années de mes études du primaire jusqu'à l'université ; je cite surtout Monsieur "Halim Lakhel, Yacine Bouguerra et Hakim Guennoune".

Je dédie ce travail à mon merveilleux père, à ma chère mère, mes sœurs et leurs petites familles, à mon frère et à mon chère mari.

Table des matières

1	Introduction	8
2	Théorie de la Fonctionnelle de la Densité	13
2.1	Introduction	13
2.2	L'approximation de <i>Hartree-Fock</i>	14
2.2.1	Approximation de particules indépendantes	15
2.2.2	Le principe variationnel	16
2.3	Matrice densité réduite d'ordre un	17
2.4	Modèle de <i>Thomas-Fermi (TF)</i>	19
2.5	Modèle de <i>Thomas-Fermi-Dirac (TFD)</i>	20
2.6	Théorie de la fonctionnelle de la densité (<i>DFT</i>)	21
2.6.1	Formulation de Hohenberg et Kohn	21
2.6.2	Formulation de <i>Kohn et Sham</i>	22
3	Systèmes en dimensions réduites	26
3.1	Introduction	26
3.2	Développement <i>semi-classique</i> de la matrice densité réduite	27
3.3	Quelques tests de la matrice densité <i>semi-classique</i>	32
3.3.1	Densité <i>semi-classique</i> de particule $\rho^{sc}(x)$	32
3.3.2	Fonctionnelle semi-classique de la densité d'énergie cinétique $\tau(\rho)$	33
3.4	Généralisation de la matrice densité semi-classique à $d = 1, 2, 3, 4$	36
3.5	Résultats numériques	40

4	Matrice densité de <i>Bloch</i>	43
4.1	Introduction	43
4.2	Formalisme de la matrice densité de Bloch $C(x, x'; \gamma)$	44
4.3	Calcul semi-classique de la Matrice densité de Bloch pour une masse effective dépendante de la position	46
4.4	Test de la matrice densité de <i>Bloch</i> $C(x, x'; \gamma)$	49
4.4.1	Slater sum $C(x; \gamma)$	49
4.4.2	Développement en série de puissances en $\hbar$ d'un calcul exact	49
4.5	Calcul exact du propagateur de Bloch	51
4.5.1	Cas d'une particule libre $V(x) = 0$	52
4.5.2	Cas d'une particule piégée dans un potentiel d'oscillateur harmonique . .	52
4.6	Résultats numériques du propagateur	55
5	Méthodes semi-classiques appliquées au noyau atomique	56
5.1	Introduction	56
5.2	Modèle <i>Thomas-Fermi</i> généralisé	57
5.2.1	Développement Wigner-Kirkwood	57
5.3	Fonctionnelle de la densité d'énergie de Skyrme avec terme de la force tenseur .	59
5.4	Interaction de <i>Skyrme</i> et Energie du noyau	60
5.4.1	Interaction de <i>Skyrme</i>	60
5.4.2	Fonctionnelle de la densité d'énergie de <i>Skyrme</i>	61
5.5	Fonctionnelle <i>Semi-classique</i> des courants de spin en présence de l'interaction tenseur	66
5.5.1	Densité de courants de spin protons $\vec{J}_p$ et neutrons $\vec{J}_n$	66
6	Conclusion	68
	Annexe	69
7	Annexe A : Matrice densité à d=4	70

8	Annexe B : Tenseur en symétrie axiale	73
9	Annexe C : Calcul des courants de spin	76
	Bibliographie	77

Abréviations

DFT	: <i>Density Functional Theory</i>
HK	: <i>Hohenberg-Kohn</i>
KS	: <i>Kohn-Sham</i>
TF	: <i>Thomas-Fermi</i>
TFD	: <i>Thomas-Fermi-Dirac</i>
$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots)$	: Fonction d'onde à N particules
$\varphi_i(\vec{r})$	: Fonction d'onde à une particule
$\rho(\vec{r})$	: Densité de particules
$\rho(\vec{r}, \vec{r}')$	: Matrice densité réduite
$C(\vec{r}, \vec{r}', \gamma)$	: Matrice densité de <i>Bloch</i>
$C_W(X, p; \gamma)$	: Transformée de <i>Wigner</i> de $C(x, x'; \gamma)$
ε_F	: Énergie du niveau de <i>Fermi</i>
V_{xc}	: Potentiel d'échange-corrélation
V_{ext}	: Potentiel extérieur
$\tau(\vec{r})$	: Densité de l'énergie cinétique
$\vec{J}(\vec{r})$	: Densité de courant
$\rho(\vec{k})$	: Transformée de <i>Fourier</i>
N	: Nombre total de particules
d	: Dimension de l'espace
Θ	: Fonction saut de <i>Heaviside</i>
δ	: Fonction <i>Delta</i>

Γ	: Fonction <i>Gamma</i>
p_f	: Impulsion au niveau de <i>Fermi</i>
<i>LDA</i>	: Local density approximation
<i>GEA</i>	: Gradient expansion approximation
<i>GGA</i>	: Generalized gradient approximation

Chapitre 1

Introduction

L'étude des propriétés des systèmes en dimensions réduites présente actuellement un intérêt scientifique, technologique ou médical très intéressant. En effet, la recherche sur des systèmes de fermions sans interactions piégés dans un potentiel de confinement doux dans des dimensions réduite ne cessent de connaitre un développement croissant et ceci se manifeste par le nombre de travaux publiés sur le sujet [1, 2]. En effet, les systèmes des gaz quantiques d'atomes ultra froids offrent une opportunité d'étudier des concepts physiques essentiels de la théorie de la matière condensée et c'est grâce aux techniques expérimentales sophistiquées qui ont été développées aux cours de ces deux dernières décennies et qui fournissent des milieux d'études avec des conditions contrôlables à travers des faisceaux lumineux (laser).

Dans les expériences du domaine des gaz quantiques, les interactions entre particules sont contrôlables en utilisant la résonance de *Feshbach* et la limite d'un gaz de fermions sans interactions est tout à fait réalisable de nos jours. Même dans cette limite (sans interactions) le système à N corps est intéressant à étudier à cause du principe de *Pauli* qui engendre des corrélations dans la fonction d'onde du système. Récemment il a été montré qu'un système de fermions sans interactions confinés à d dimensions, présente des fluctuations quantiques et thermiques riches et universelles, à cause du carré de la fonction d'onde à plusieurs corps du système. Ces études ont d'abord été réalisées en coordonnées spatiales, ensuite elles ont été étendues à l'espace des phases de *Wigner*. Par exemple, il a été démontré que la fonction de distribution de *Wigner* des fermions N sans interaction piégés dans un potentiel de confinement doux dans une dimensions d de l'espace possède deux contributions dans la limite où N est très

grand : une contribution de volume (en anglais "Bulk contribution") et une contribution de bord (en anglais "Edge contribution"). La contribution en volume est constante sur un domaine fini dans l'espace des phases $(\vec{r}, \vec{p})$ et s'annule à l'extérieur. Les contributions de bord qui sont dues au gradient du potentiel de confinement, présentent un comportement universel de scaling. Notons aussi que les propriétés de fermions sans interactions dans les potentiels de bords-abrupts a fait l'objet d'une récente étude [3].

L'étude de la dynamique de non-équilibre des systèmes quantiques à plusieurs corps est d'un grand intérêt [4, 5]. Une situation quantique du non-équilibre peut être réalisée expérimentalement dans le domaine de gaz des atomes ultra-froids [6, 7], à travers ce qu'on appelle le quench quantique. Ce quench consiste à un changement rapide dans les paramètres de l'hamiltonien du système et l'évolution au cours du temps est examinée. Pour des systèmes de gaz de *Fermi* sans interactions, il a été démontré que l'évolution au cours du temps d'un gaz de *Fermi* à 1d présente des propriétés intéressantes [2, 8].

La fonction de distribution de *Wigner* [9] est une grandeur intéressante et elle est définie comme la transformation de *Fourier* par rapport aux coordonnées relatives $\vec{s} = \vec{r} - \vec{r}'$ de la matrice de densité réduite d'ordre un $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$. Une expression analytique de la matrice densité à un corps pour un système de N fermions confinés dans un potentiel arbitraire $V(r)$ n'est pas disponible jusqu'à présent, il faut recourir à des approximations telles que le développement *semi-classique*. La méthode *semi-classique* peut être obtenue par diverses techniques, telle que la méthode connue *WKB* qui consiste principalement à introduire un développement en puissance de $\hbar$ de la fonction d'onde. Une seconde voie consiste à développer en série de puissances de $\hbar$ soit l'opérateur de *Bloch* $e^{-\beta\hat{H}}$, qui est appelé développement de *Wigner-Kirkwood* [10], soit directement l'opérateur densité $\hat{\rho}$, méthode de *Kirzhnits* [11] ou la méthode de *Grammaticos et Voros* [12]. A l'ordre zéro en $\hbar$ l'approximation *semi-classique* ainsi obtenue s'appelle approximation de *Thomas-Fermi* [13, 14] et la prise en compte des termes supérieurs en $\hbar$ porte le nom du modèle de *Thomas-Fermi* étendue. Récemment, un développement *semi-classique* de la matrice densité réduite à un corps, a été obtenue, jusqu'à l'ordre $\hbar^2$, en trois dimensions (3d) [15] et en deux dimensions (2d) [16]. Ce calcul *semi-classique* est obtenu en utilisant la méthode de transformation de *Wigner* utilisée par *Grammaticos et Voros*. La méthode de *Grammaticos et Voros* a l'avantage de préserver à la fois l'hermiticité et l'idempotence de la matrice densité.

Dans cette thèse on se propose d'utiliser la méthode *semi-classique* dans deux domaines de recherches : les systèmes à dimension réduites et en physique nucléaire.

Dans la première partie de cette thèse nous nous intéressons à obtenir un développement *semi-classique* de la matrice densité réduite à un corps à une dimension ($1d$) d'un système de N fermions indépendants en considérant une situation générale où l'Hamiltonien contient une masse effective spatialement variable. L'intérêt de considérer un Hamiltonien avec masse effective dépendante de la position vient du fait qu'il apparaît dans diverses domaines de recherches, comme dans l'étude des propriétés électroniques des semi-conducteurs [17], les quantum dots [19], **les clusters** ^3He [20] et les liquides quantiques [21]. Nous nous sommes essentiellement attachés à détailler le calcul *semi-classique* de la matrice densité réduite d'ordre un $\rho(x, x')$ pour la comparer avec celle obtenue exactement pour un gaz de fermions à $1d$ piégé dans un potentiel de l'oscillateur harmonique et où une expression analytique exacte est disponible quelque soit le nombre de particules.

Dans cette thèse nous nous intéressons aussi au calcul de la matrice densité de *Bloch* (*MDB*) ou *propagateur de Bloch* [7]. L'importance physique de cette grandeur vient du fait qu'elle est reliée, comme on va le voir plus loin, à la matrice densité réduite d'ordre un $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$, à travers une transformée de *Laplace* inverse. Une fois obtenu cette matrice densité, on peut par exemple calculer la densité énergie cinétique $\tau(\vec{r})$, la densité de courant $\vec{J}(\vec{r})$ et aussi la transformée de *Fourier* $n(\vec{k})$ de la densité locale $\rho(\vec{r})$.

La seconde partie de la thèse porte sur l'application de la méthode *semi-classique* en physique nucléaire et plus particulièrement sur la prise en compte des termes tenseurs dans l'interaction effective nucléon-nucléon. Dans le cadre de l'approche de *Hartree-Fock* avec une interaction de type *Skyrme* et combinée avec la méthode semiclassique de *Thomas-Fermi* étendue on s'est intéressé à examiner les courants de spin générés par la présence du terme tenseurs dans l'interaction et en considérant la symétrie axiale du champ moyen.

Le présent manuscrit est constitué de cinq chapitres et est organisé comme suit :

Une introduction générale. Un second chapitre où on rappelle quelques notions sur la matrice densité, grandeur qui constitue un point central de notre étude. Ensuite pour des raisons pédagogiques nous exposons l'approche de *Hartree-Fock* et les modèles de *Thomas-Fermi* et ses extensions, car ces modèles sont apparus avant l'avènement de la théorie de la *DFT* mon-

trant déjà l'importance de la densité de particules $\rho(\vec{r})$ comme variable dans la description des systèmes de N fermions en interactions. Enfin on termine ce chapitre 2 par un bref exposé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (*DFT*) où on présente les versions de *Hohenberg-Kohn* (*HK*) [22] et de *Kohn-Sham* (*KS*) [23].

Dans le chapitre 3, on présente l'essentiel de notre travail. Nous étudions ici un système de N fermions indépendants à $1d$ confiné dans un potentiel arbitraire $V(x)$ et dont l'Hamiltonien comporte une masse effective dépendante de la position notée $m^*(x)$. Après avoir introduit la méthode *semi-classique* de *Grammaticos-Voros*, on calcule ensuite la matrice densité réduite semi-classique d'ordre un $\rho^{sc}(x, x')$. Afin de tester notre expression analytique, nous avons effectué deux tests : Pour $x = x'$, on a retrouvé la même expression analytique de la densité $\rho(x)$ obtenue auparavant par les auteurs de la référence [24], nous avons aussi vérifié que notre densité d'énergie cinétique $\tau(\rho)$ déduite de notre matrice densité est identique à celle calculée dans [24]. Par ailleurs et dans le cas d'un Hamiltonien avec une masse effective constante, nous avons établi l'expression analytique semi-classique de la matrice densité réduite $\rho_{d=4}^{sc}(\vec{r}, \vec{r}')$ pour un système de fermions confiné dans un espace de dimension $d = 4$. Comme les expressions de cette matrice densité existent en $d = 1, 2, 3$, nous avons réussi à écrire une expression unique de cette matrice densité $\rho_d^{sc}(\vec{r}, \vec{r}')$ en fonction de la dimension $d = 1, 2, 3, 4$ de l'espace. Enfin ce chapitre se termine par une comparaison numérique entre les expressions des matrices densités *semi-classique* et exacte, dans le cas d'un confinement par un potentiel oscillateur harmonique à $1d$.

Le chapitre 4, constitue une extension d'un travail publiée en 2013 [58]. Ceci consiste à un calcul *semi-classique* du propagateur de *Bloch* $C(x, x'; \gamma)$ à partir de la matrice densité obtenue dans le chapitre trois dans le cas d'un potentiel d'oscillateur harmonique à $1d$ en présence d'une masse effective dépendante de la position $m^*(x)$. Nous avons examiné numériquement la pertinence de la technique *semi-classique*.

Le cinquième chapitre, consiste en une utilisation de la méthode *semi-classique* en physique nucléaire. En effet nous avons calculé les courants de spin engendrés par présence des termes tenseurs dans le potentiel moyen en symétrie axiale de l'approche de *Hartree-Fock* d'un système de nucléons d'un noyau atomique.

Le manuscrit contient aussi trois appendices et se termine par une conclusion générale

dans laquelle nous résumons les principaux résultats obtenus dans ce travail et les possibles extensions.

Chapitre 2

Théorie de la Fonctionnelle de la Densité

2.1 Introduction

La résolution de problèmes à N corps en mécanique quantique consiste à trouver les solutions de l'équation de Schrödinger d'une manière exacte et qui sera ensuite simplifiée par plusieurs approximations afin qu'elle puisse être résolue.

Dans ce chapitre, nous présenterons deux méthodes qui sont plus efficaces, c'est la méthode de *Hartree-Fock* et la théorie de la fonctionnelle de la densité que l'on abrège par "*DFT*" et qui est devenue un outil largement utilisé pour la description et l'analyse des propriétés électroniques des systèmes physiques et chimiques ayant un grand nombre d'électrons. Cette méthode utilise la densité de particules comme une variable fondamentale pour la description des propriétés de systèmes de fermions en interactions. On peut considérer que l'année 1964 est l'année de la naissance de cette théorie. Bien avant cette date il existait déjà des modèles simples qui utilisaient la densité de particules comme variable au lieu de la fonction d'onde et il est instructif de rappeler ces modèles avant l'avènement de la *DFT*.

Dans un système de N particules, la description du comportement de ces particules soumises à leurs interactions, se fait à l'aide de la fonction d'onde totale $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ qui contient

toutes les informations sur ce système et est solution de l'équation aux valeurs propres, soit

$$H\Psi = E\Psi \quad (2.1)$$

où E est l'énergie totale et H est l'hamiltonien de N fermions en interactions du système étudié, qui s'écrit

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N V(i,j) \quad (2.2)$$

Dans l'équation ci-dessus, les deux termes de l'hamiltonien H désignent les opérateurs, énergie cinétique totale notée $\hat{T}$ et l'énergie potentielle d'interaction à deux corps $\hat{V}$.

Un des problèmes rencontrés dans les calculs pour un système constitué de N fermions, avec N allant de quelques unités à quelques centaines, est de résoudre l'équation de *Schrödinger* (2.1) c'est pour cela, qu'on est amené à effectuer des approximations. La suite de ce chapitre est organisée comme suit. Dans le prochain paragraphe on va discuter la méthode de *Hartree-Fock* qui réduit le problème de particules en interactions à celui de particules indépendantes en prenant comme fonction d'onde du système un déterminant de Slater construit par des fonctions d'ondes à une particule. Cette simplification essentielle du problème à N corps, constitue l'hypothèse fondamentale de toutes les approches du type champ moyen. Ensuite on passe à un bref rappel sur la matrice densité réduite. Dans les paragraphes (2.4) et (2.5) qui vont suivre, on expose les méthodes de *Thomas-Fermi* (*TF*) et *Thomas-Fermi Dirac* (*TFD*) qui montrent l'importance que joue la densité locale de particules dans la description du système de plusieurs particules. Enfin dans le dernier paragraphe (2.6) la théorie formelle de la *DFT* sera exposée.

2.2 L'approximation de *Hartree-Fock*

L'approximation de *Hartree-Fock* est une approche de champ moyen non relativiste. Ce formalisme repose sur l'approximation de particules indépendantes et ne prend en compte que les corrélations de *Pauli*. Cette approche a été développée pour la première fois par *Hartree* en 1928, pour décrire la structure électronique des atomes, en tenant compte de l'interaction électrostatique à deux corps entre les électrons. Il a introduit la notion d'orbitales moléculaires et atomiques, et a proposé d'approcher la fonction d'onde à N fermions par un produit de N

fonctions d'ondes individuelles de chaque particule $|\varphi_i\rangle$, appelées spinorbitales. Mais, dans son modèle *Hartree* n'a pas inclus les effets du principe de *Pauli*. La fonction d'onde de *Hartree* $|\Psi\rangle_H = |\varphi_1\rangle \cdot |\varphi_2\rangle \cdot |\varphi_3\rangle \dots \dots \dots |\varphi_N\rangle$ ne satisfait pas la condition d'antisymétrie par rapport à l'échange de paire de fermions.

En 1930 [25], *Fock* a introduit le principe d'antisymétrie de la fonction d'onde, c'est-à-dire les effets du principe de *Pauli*, et par conséquent l'effet d'échange dans la méthode de *Hartree* [26]. La fonction d'onde $|\Psi\rangle_{HF}$, qui tient compte du principe de *Pauli* est approchée par un produit des fonctions d'ondes individuelles antisymétrisées. Ceci permet de réduire le problème de plusieurs corps en interaction, à une description de particules indépendantes où chaque particule subit l'effet d'un champ moyen.

L'approximation de *Hartree-Fock* [25, 26], n'est devenue réellement utilisable qu'à partir des années cinquantes, avec l'invention des ordinateurs, qui a permis d'élargir les possibilités d'applications. L'approche a été mise en oeuvre en physique nucléaire pour la première fois en 1963 par *Kelson* [27].

2.2.1 Approximation de particules indépendantes

Comme indiqué ci-dessus l'approche de *Hartree-Fock* consiste à approximer la fonction d'onde du système par un déterminant de *Slater* [28], soit

$$\Psi_{HF}(x_1, x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_1(x_2) & \dots & \varphi_1(x_N) \\ \varphi_2(x_1) & \varphi_2(x_2) & \dots & \varphi_2(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(x_1) & \varphi_N(x_2) & \dots & \varphi_N(x_N) \end{vmatrix}$$

où $\varphi_i(x_j)$ est la fonction d'onde d'une particule j dans un état à un corps i appelée état individuel ou spin-orbitale qui est le produit d'une orbitale avec une fonction de spin de la particule $x_j = (\vec{r}_j, \sigma_j)$ et le facteur $1/\sqrt{N!}$ est la constante de normalisation. Pour déterminer les fonctions d'ondes individuelles de chaque particule correspondant à l'état fondamental du système, on utilise le principe variationnel.

2.2.2 Le principe variationnel

Il consiste en la minimisation de l'énergie totale $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ en tenant compte de la contrainte de normalisation des fonctions d'ondes à une particule $\varphi_i(\vec{r})$ pour cela on introduit des paramètres de Lagrange notés $\varepsilon_{i=1\dots N}$. On a donc

$$\frac{\delta}{\delta \varphi_i^*(\vec{r})} \left[\langle \Psi | H | \Psi \rangle - \sum_{j=1}^N \varepsilon_j \int |\varphi_j(\vec{r})|^2 d^3r \right] = 0 \quad (2.3)$$

La minimisation de l'équation (2.3) nous conduit à un problème aux valeurs propres d'un opérateur à une particule

$$\hat{h}(i) |\varphi_i\rangle = \varepsilon_i |\varphi_i\rangle \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.4)$$

où $|\varphi_i\rangle$ et ε_i sont respectivement les états et les énergies propres à une particule et $\hat{h}(i)$ est l'Hamiltonien à un corps de la particule i .

En d'autres termes, cette approche consiste à réduire le problème à N -corps en interactions avec une description de particules dans un champ moyen (c'est-à-dire que les fermions se déplacent indépendamment dans un champ moyen créé par les autres fermions), soit

$$\hat{H}_{HF} = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i = \hat{T} + \hat{U}_{HF} \quad (2.5)$$

$\hat{U}_{HF}$ est la réduction de l'opérateur à un corps pour ρ , à partir de l'opérateur deux corps V .

L'application de la procédure de la minimisation de l'énergie amène aux équations de *Hartree-Fock*. En représentation position, on déduit ces équations qui sont un ensemble d'équations intégral-différentielles de type *Schrödinger*

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_i^2 + V_H(\vec{r}) + V_F(\vec{r}) \right\} \varphi_i(\vec{r}) = E_i \varphi_i(\vec{r}), \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.6)$$

où ici l'opérateur $\frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_i^2$ correspond à l'énergie cinétique de la particule individuelle i

♦ $V_H(\vec{r})$ est le potentiel Coulombien dit de *Hartree* (potentiel direct) et représente le potentiel moyen créé par les autres particules. On peut écrire ce terme en fonction de la densité des particules $\rho(\vec{r}) = \sum_i^N |\varphi_i(\vec{r})|^2$, telle que

$$V_H(\vec{r}) = \int \rho(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') d\vec{r}' \quad (2.7)$$

♦ V_F est le potentiel non local de *Fock*. Il représente le potentiel d'échange et provient de l'antisymétrie de la fonction d'onde totale dans l'échange de deux particules quelconques. Il est défini par son action sur les fonctions individuelles $\varphi_i(\vec{r})$, telle que

$$V_F \varphi_i(\vec{r}) = -\frac{1}{2} \int \rho(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_i(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (2.8)$$

Pratiquement, l'approximation de *Hartree-Fock* conduit à de bons résultats, notamment en physique nucléaire et moléculaire [29, 30], mais elle néglige la corrélation entre les particules dans l'énergie totale. En effet, considérer que chaque particule dans le système baigne dans un champ moyen créé par les autres particules, revient à négliger l'énergie de corrélation E_C (par exemple, corrélations d'appariement et corrélations vibrationnelles....etc). Cette énergie est très petite par rapport aux autres énergies mais n'est pas négligeable. L'énergie de *Hartree-Fock* ne contient pas le terme d'énergie de corrélation donné par la différence entre l'énergie exacte et celle de *Hartree-Fock*,

$$E_C = E_{exact} - E_{HF} \quad (2.9)$$

Cependant, cette méthode donne de bons résultats et est assez lourde pour un système de taille moyenne (incluant par exemple vingt atomes). Cette représentation de *Hartree Fock* est loin d'être réelle, mais elle sert néanmoins comme base pour résoudre le problème à N -corps. En fait, ces méthodes sont très coûteuses en termes de calcul du temps et de capacité de stockage et ne contiennent pas le terme d'énergie de corrélation. La méthode de la fonctionnelle de la densité *DFT*, comme nous allons le voir dans ce qui suit, permet la prise en compte de l'énergie de corrélation. C'est une alternative intéressante pour incorporer la corrélation dans le calcul quantique en considérant la densité de particules comme quantité de base pour la description du système.

2.3 Matrice densité réduite d'ordre un

On considère un système de N fermions en interaction dont l'état est décrit par la fonction $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ avec $x_i = (\vec{r}_i, \sigma_i)$.

On définit la matrice densité réduite d'ordre un par

$$\gamma(x_1, x'_1) = N \int dx_2 dx_3 \dots dx_N \Psi^*(x_1, x_2, \dots, x_N) \Psi(x'_1, x_2, \dots, x_N) \quad (2.10)$$

Où l'intégral $\int dx_i$, signifie $\sum_{\sigma_i} \int d\vec{r}_i$.

On montre que la matrice densité d'ordre un prend une forme simple, dans le cas où la fonction d'onde totale du système est un déterminant de *Slater* construit sur les états occupés à une particule $\varphi_i(x_j)$ d'énergie ε_i , soit

$$\gamma(x_1, x'_1) = \sum_{i=1}^{\infty} \varphi_i(x_1) \varphi_i^*(x'_1) \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_i) \quad (2.11)$$

Où $\theta(\varepsilon_F - \varepsilon_i)$ est la fonction de *Heaviside* définie, en fonction de l'énergie de *Fermi* ε_F , par

$$\theta(\varepsilon_F - \varepsilon_i) = \begin{cases} 1 & \text{si } \varepsilon_i \prec \varepsilon_F \\ 0 & \text{si } \varepsilon_i \succ \varepsilon_F \end{cases} \quad (2.12)$$

Cette matrice densité vérifie les propriétés suivantes

- La propriété d'idempotence, $\gamma^2 = \gamma$, ce qui traduit en représentation position par

$$\int dx'' \gamma(x, x'') \gamma(x'', x') = \gamma(x, x') \quad (2.13)$$

Pour un hamiltonien indépendant du spin, on utilise la matrice densité réduite d'ordre un sommée sur les spins. Cette matrice sera tout simplement notée $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{\sigma=\pm 1} \gamma(\vec{r}', \sigma, \vec{r}, \sigma) \quad (2.14)$$

- Si $\vec{r} = \vec{r}'$ donc $\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r}, \vec{r})$, avec la conservation du nombre de particule

$$\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} = N \quad (2.15)$$

Ceci étant, nous allons définir l'énergie cinétique totale du système constituée de N fermions indépendants et l'exprimer en fonction de la matrice densité $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$, soit

$$T_s = \sum_{i=1}^N \left\langle \varphi_i \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_i^2 \right| \varphi_i \right\rangle \quad (2.16)$$

Qui peut se mettre, en effectuant une integration par parties sous la forme suivante

$$T_s = \int \tau(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.17)$$

Où $\tau(\vec{r})$ représente la densité d'énergie cinétique et s'exprime en fonction de la matrice densité $\rho(\vec{r}', \vec{r})$ par la relation exacte suivante

$$\tau(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\vec{\nabla}_{\vec{r}} \vec{\nabla}_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}, \vec{r}') \right]_{\vec{r}=\vec{r}'} \quad (2.18)$$

En plus de l'approximation de *HF*, il existe une autre approximation tout à fait différente ; c'est la "*DFT*" qui remonte au travail de *Thomas-Fermi* et qui est développée plus tard par *Hohenberg-Kohn* et *Kohn-Sham* dans le but de définir un nouveau modèle basé uniquement sur la densité de particules du système ρ .

2.4 Modèle de *Thomas-Fermi* (TF)

Dans ce paragraphe, nous allons exposer la méthode de *TF* et ses extensions. Ce modèle a été développé pour la première fois par *Thomas et Fermi* qui ont proposé un modèle basé seulement sur la densité électronique $\rho(\vec{r})$ pour comprendre la structure électronique des solides, dans leur état fondamental. Ce modèle est fondé sur l'hypothèse que dans l'atome les électrons ne sont pas corrélés.

On considère N fermions plongés dans un potentiel externe $V_{ext}(\vec{r})$ et interagissent entre eux par une interaction de *Coulomb* $V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$. L'hamiltonien H de N électrons en interaction du système étudié, s'écrit

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \sum_{i=1}^N V_{ext}(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{ke^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Dans cette approche, la fonction d'onde est une onde plane et par conséquent, on montre que la densité d'énergie cinétique s'écrit comme une fonctionnelle de la densité de particules $\rho(\vec{r})$ seul, soit

$$\tau^{TF}(\rho) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{5} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \rho^{\frac{5}{3}} \quad (2.19)$$

Dans ce modèle, l'énergie totale du système s'écrit alors

$$E^{TF}(\rho) = T^{TF}(\rho) + U_H(\rho) + \int V_{ext}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.20)$$

Dans lequel le terme $T^{TF}(\rho)$ représente l'énergie cinétique totale du système donnée par les équations (2.17) et (2.19), soit

$$T^{TF}(\rho) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{5} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int \rho^{\frac{5}{3}}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.21)$$

et le second terme $U_H(\rho)$ représente l'énergie potentielle électrostatique classique (terme de *Hartree*) donné par l'équation (2.7), soit

$$U_H(\rho) = \frac{ke^2}{2} \int \int \frac{\rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' \quad (2.22)$$

le dernier terme est l'énergie d'interaction des électrons avec un potentiel extérieur $V_{ext}(\vec{r})$

Pour déterminer la densité ρ correspondant à l'état fondamental, on doit résoudre le problème variationnel avec la contrainte de minimisation

$$\frac{\delta}{\delta \rho} \left[E^{TF} - \lambda \int \rho(\vec{r}) d\vec{r} \right] = 0 \quad (2.23)$$

après la minimisation, on obtient l'équation

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{5} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \rho^{\frac{2}{3}}(\vec{r}) + \frac{ke^2}{2} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{ext}(\vec{r}) = \lambda \quad (2.24)$$

Cependant, ce modèle représente en fait la première formulation de la théorie de la fonctionnelle de densité *DFT* et contient une forte approximation sur l'énergie cinétique $T^{TF}(\rho)$. L'application de cette approche aux atomes et aux molécules montre que ce modèle présente des limitations sévères. Il ne prend pas en compte les effets d'échanges des électrons, conséquence du principe de *Pauli*. Ce qui a été confirmé plus tard par *Dirac*. Ce dernier donne une proposition comment y incorporer l'échange des électrons en ajoutant une fonctionnelle d'énergie d'échange.

2.5 Modèle de *Thomas-Fermi-Dirac* (TFD)

Pour mieux décrire l'interaction entre les électrons, *Dirac* a proposé d'inclure un terme qui tient compte du principe de *Pauli* et par conséquent la fonction d'onde totale doit être antisymétrique dans l'échange de deux fermions. Cette énergie supplémentaire d'origine purement quantique est appelée énergie d'échange. Dans la théorie de *Hartree-Fock*, ce terme est appelé terme de *Fock*. On obtient la célèbre formule de l'énergie d'échange de *Dirac* [31] et [32],

$$E_x^{TFD}(\rho) = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \int \rho^{\frac{4}{3}}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.25)$$

L'addition du terme d'échange $E_x^{TFD}(\rho)$ à l'équation (2.20) conduit à la fonctionnelle d'énergie de *Thomas-Fermi-Dirac* est,

$$\begin{aligned} E^{TFD}(\rho) &= E^{TF} + E_x^{TFD} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{5} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int \rho^{\frac{5}{3}}(\vec{r}) d^3r - \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \int \rho^{\frac{4}{3}}(\vec{r}) d\vec{r} \\ &\quad + \frac{ke^2}{2} \int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + \int V_{ext}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Plus tard en 1935, *Weizsäcker* a amélioré le modèle de *TFD* en prenant en compte le gradient de la densité dans l'expression de la fonctionnelle de la densité d'énergie cinétique où le terme ajouté est le terme de *Weizsäcker*. Ce terme s'écrit comme suit

$$T_{Wiz}(\rho) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{36} \int \frac{(\vec{\nabla} \rho)^2}{\rho} d\vec{r} \quad (2.27)$$

Bien que la méthode de *TF* ait été corrigée par le terme d'échange de *Dirac* et le terme de *Weizsäcker*, ce modèle reste limité, mais il peut être vu comme une approximation d'une théorie exacte c'est la "*DFT*".

2.6 Théorie de la fonctionnelle de la densité (*DFT*)

La *DFT* est la théorie la plus populaire et la plus puissante approche quantique pour la solution du problème à N particules en interaction. En effet, de nos jours elle est appliquée au calcul des énergies de liaisons des molécules en chimie, et au calcul des structures de bandes en physique du solide. Son champ d'application s'est beaucoup élargie, allant vers des applications en biologie [33], effets relativistes [34], propriétés magnétiques [35]. Cette théorie qui est en principe exacte substitue la densité locale de particules $\rho(\vec{r})$ du système à sa fonction d'onde. Ce fait, constitua l'origine de la fonctionnelle de la densité (*DFT*), qui fut formulée plus tard par *Hohenberg et kohn* en 1964. Ces auteurs ont prouvé que pour un potentiel extérieur V_{ext} , il existe une fonctionnelle de la densité électronique du système, $E(\rho)$ et que la densité $\rho = \rho_0$ qui minimise $E(\rho)$ est la densité exacte de l'état fondamental. Ce modèle est la base de la (*DFT*), il sera exposé dans la prochaine section.

2.6.1 Formulation de Hohenberg et Kohn

Ce théorème énonce que la densité de particule $\rho(\vec{r})$ est une variable suffisante pour décrire toute autre grandeur en fonction de cette densité, par conséquent l'énergie totale du système de fermions en interaction $E(\rho)$ est une fonctionnelle de la densité de particule $\rho(\vec{r})$ [22]. Une conséquence immédiate de ce théorème est que la densité des particules détermine de façon unique le Hamiltonien $\hat{H}$. Cela signifie que le potentiel externe $V_{ex}(\vec{r})$ est déterminé de façon unique, à une constante près, par la densité d'état fondamentale $\rho(\vec{r})$. comme $V_{ex}(\vec{r})$ définit

à son tour le Hamiltonien $\hat{H}$, toutes les propriétés du système peuvent être complètement déterminées si l'on connaît la densité électronique de l'état fondamentale $\rho_0(\vec{r})$. Alors l'énergie totale du système à l'état fondamental est également une fonctionnelle uniquement de la densité de particules $E_{HK}(\rho)$, qui est définie comme,

$$E_{HK}(\rho) = T(\rho) + U_{ee}(\rho) + \int V_{ext}(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} \quad (2.28)$$

où $E_{HK}(\rho)$, représente la fonctionnelle universelle de *Hohenberg et Kohn* [22], qui contient tous les effets d'échange et de corrélation. $T(\rho)$ est l'énergie cinétique totale du système et $U_{ee}(\rho)$ désigne l'énergie d'interaction de *Coulomb*.

Le deuxième théorème de *HK* établit le caractère variationnel de l'énergie, en minimisant la fonctionnelle $E_{HK}(\rho)$, par rapport à la densité de particule $\rho(\vec{r})$.

$$\frac{\delta}{\delta\rho(\vec{r})} \left[E_{HK}(\rho) - \lambda \int d\vec{r}' \rho(\vec{r}') \right] = 0 \quad (2.29)$$

Où λ est un paramètre de *Lagrange* qui tient compte de la contrainte de normalisation de la densité de particules $\int d\vec{r} \rho(\vec{r}) = N$.

Nous pouvons appliquer cette méthode à n'importe quel système une fois que nous avons une forme explicite de $E_{HK}(\rho)$ (approximativement ou exacte). La densité électronique de cette reformulation joue un rôle clé. Cependant, le problème est qu'on ne connaît pas la dépendance de $E_{HK}(\rho)$ dans ρ d'une façon exacte à l'heure actuelle, sauf le fait qu'elle doit exister. Donc, le théorème de *Hohenberg-Kohn* doit être exploitée par des approximations d'une manière effective. Dans cette situation, *Kohn et Sham* [23] ont proposé de recourir à des approximations pour exploiter de façon effective le théorème de *Hohenberg et Kohn*.

2.6.2 Formulation de *Kohn et Sham*

Kohn et Sham ont proposé en 1965 [23] de remplacer le système d'électrons réel, dont le problème est impossible à résoudre analytiquement, par un système auxiliaire d'électrons indépendants sans interaction évoluant dans un potentiel effectif, dont l'état fondamental est caractérisé en tout point de l'espace par la même densité de particules que celle du système réel, et par conséquent même énergie.

Ces auteurs proposent d'introduire un ensemble de N fonctions d'ondes à une particule $\{\varphi_i^{KS}(\vec{r}), i = 1, 2, \dots, N\}$ et de réexprimer la fonctionnelle d'énergie de *Hohenberg-Kohn*, $E_{HK}(\rho)$ pour le système auxiliaire d'électrons sans interaction, ayant même densité ρ que le système réel et par conséquent même énergie $E_{HK}(\rho) = E^{KS}(\rho)$. L'énergie totale $E^{KS}(\rho)$ du système s'écrit,

$$E^{KS}(\rho) = T_s[\{\varphi_i(\vec{r})\}] + E_H(\rho) + E_{xc}(\rho) + \int V_{ext}(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} \quad (2.30)$$

où $T_s(\rho) = T_s[\{\varphi_i^{KS}(\vec{r})\}]$ est la densité cinétique exacte du système d'électrons sans interaction (l'indice s dans $T_s(\rho)$ est une abréviation du terme anglais single particle).

$$T_s(\rho) = T_s[\{\varphi_i^{KS}(\vec{r})\}] = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \left| \vec{\nabla}^2 \varphi_i^{KS}(\vec{r}) \right|^2 \quad (2.31)$$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \left| \varphi_i^{KS}(\vec{r}) \right|^2 \quad (2.32)$$

$E_H(\rho)$ désigne l'énergie électrostatique de *Hartree* donné par l'équation (2.22) et calculée dans l'approche de *Hartree-Fock*. $E_{xc}(\rho)$ s'appelle énergie d'échange-corrélation du système.

Le passage de l'équation (2.28) qui donne l'énergie $E_{HK}(\rho)$ dans la formulation de HK à la forme (2.30) de l'énergie $E^{KS}(\rho)$ dans la formulation de KS se fait en ajoutant et en retranchant le terme $(T_s(\rho) - E_H(\rho))$ dans l'équation (2.28), on peut donc écrire

$$\begin{aligned} E^{KS}(\rho) &= T_s(\rho) + E_H(\rho) + [\{T(\rho) - T_s(\rho)\} + \{U_{ee}(\rho) - E_H(\rho)\}] \\ &\quad + \int V_{ext}(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} \end{aligned} \quad (2.33)$$

posons

$$E_{xc}(\rho) = [\{T(\rho) - T_s(\rho)\} + \{U_{ee}(\rho) - E_H(\rho)\}]$$

La minimisation de l'énergie dans l'équation (2.33), par rapport aux fonctions d'ondes à une particule $\varphi_i^{KS}(\vec{r})$ où la sommation sur j s'étend à toutes les orbitales occupées

$$\frac{\delta}{\delta \varphi_i^{KS}} \left[E^{KS}(\rho) - \sum_{j=1}^N \varepsilon_j \int |\varphi_j^{KS}(\vec{r})|^2 d^3r \right] = 0 \quad i = 1 \dots N \quad (2.34)$$

permet d'obtenir ainsi un ensemble d'équations de type de *Schrödinger* connu sous le nom des équations de *Kohn-Sham*, soit

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + v_{KS}(\vec{r}) \right] \varphi_i^{KS}(\vec{r}) = \varepsilon_i \varphi_i^{KS}(\vec{r}) \quad (2.35)$$

où $v_{KS}(\vec{r})$ est un potentiel effective moyen, défini par

$$v_{KS}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \quad (2.36)$$

avec

$$V_H(\vec{r}) = \frac{ke^2}{2} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'$$

et $V_{xc}(\rho(\vec{r}))$ représente le potentiel d'échange-corrélation défini par la dérivée fonctionnelle

$$V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}(\rho)}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (2.37)$$

Dans la théorie *KS*, l'énergie d'échange-corrélation $E_{xc}(\rho)$ demeure inconnue. En pratique, cette énergie est calculée approximativement et souvent il est préférable de la séparer en deux parties, l'énergie d'échange E_x et l'énergie de corrélation E_{corr}

$$E_{xc}(\rho) = E_x + E_{corr} \quad (2.38)$$

Où, par définition de l'énergie d'échange on prend

$$E_x(\rho) = \langle \Phi_s | U_{ee} | \Phi_s \rangle - E_H(\rho) \quad (2.39)$$

Où $|\Phi_s\rangle$ est le déterminant de Slater construit avec les états à une particule de *Kohn-Sham*. Dans la formulation de *KS*, l'énergie d'échange s'écrit en fonction de la matrice densité réduite d'ordre un $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$, soit

$$E_x = -\frac{ke^2}{4} \iint \frac{|\rho(\vec{r}, \vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' \quad (2.40)$$

En effet l'énergie cinétique T_s et l'énergie d'échange E_x s'expriment en fonction de la matrice densité réduite d'ordre un $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$ à travers les équations (2.17) et (2.40). Cette matrice densité a été calculée approximativement en série de puissances de $\hbar$ jusqu'à l'ordre deux par *Gross et Dreizler* [31] avec la méthode *semi-classique* de *Kirzhnits*. La matrice densité ainsi obtenue a été utilisée pour calculer l'énergie d'échange et obtenir ce qu'on appelle la correction en gradient de la densité jusqu'à l'ordre deux. Dans la *DFT*, ce développement de l'énergie d'échange s'appelle approximation du gradient de la densité *GEA* [36]. Il a été réalisé que cette expression n'améliore pas les résultats en comparaison avec celle de la *LDA* (en anglais, local density approximation) [37, 38, 39]. Cette dernière n'inclus pas les corrections en gradient

de la densité, ce qui ensuite a historiquement motivé l'émergence de la méthode du gradient généralisé ou en anglais Generalized gradient expansion *GGA*.

Nous utiliserons la méthode *semi-classique* pour calculer la matrice densité réduite d'ordre un dans le prochain chapitre.

Chapitre 3

Systèmes en dimensions réduites

3.1 Introduction

La description et l'analyse des systèmes physiques sont obtenus à partir de la matrice densité de particule à un corps $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$, grandeur fondamentale, à partir de laquelle toutes les propriétés quantiques des gaz quantiques sont déduites. Cette matrice de densité, appelée matrice densité réduite $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$, contient plus d'informations que la densité de particules locale $\rho(\vec{r})$ et présente une importance dans la théorie de la fonctionnelle de la densité *DFT* appliquée aux systèmes de particules en interactions, car elle permet de calculer les fonctionnelles de l'énergie cinétique et de l'énergie de l'interaction. La *DFT* stipule que la densité électronique est une variable de base et par conséquent l'énergie totale d'un système composé de N fermions peut être exprimée comme la fonctionnelle de cette densité de particules. Une autre raison de calculer la matrice densité réduite $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$ est que sa transformée de *Fourier* $\rho(\vec{k})$ est une quantité expérimentale obtenue en mesurant la forme de la ligne dans la diffusion Compton. Plusieurs travaux concernant le calcul de $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$ ont été récemment réalisés pour un système de fermions confinés à deux dimensions ($2d$) [16] et en trois dimensions ($3d$) [15] dans le cadre de l'approximation *semi-classique* pour une masse constante.

Dans ce chapitre nous construirons une forme analytique approchée, en exploitant le calcul *semi-classique* de la matrice densité réduite $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$ d'ordre un, pour un système de fermions confinés dans l'espace à d dimensions par un potentiel extérieur $V_{ext}(\vec{r})$, jusqu'à l'ordre $\hbar^2$.

Dans se contexte on se propose de calculer la matrice densité réduite $\rho(x, x')$ à $1d$ sous forme d'un développement en série de puissance de $\hbar$. Une application possible est le calcul de l'énergie d'échange du système, qui fait intervenir cette matrice densité réduite [30, 40]. Ce travail a été validé par plusieurs tests concernant les propriétés de la matrice densité réduite d'ordre un.

Nous examinerons numériquement la pertinence des termes dépendants de la masse effective. Les résultats obtenus seront comparés à ceux obtenus exactement, ce qui nous a permettra de situer certains aspects de la performance des calculs *semi classiques*.

3.2 Développement *semi-classique* de la matrice densité réduite

L'approximation *semi-classique* de *Thomas Fermi* étendue (*ETF*) permet d'obtenir la densité d'énergie cinétique en fonction de la densité de particules $\rho(\vec{r})$. Cette méthode *semi-classique* exprime la matrice densité, grandeur fondamentale, à partir de laquelle on calcule les propriétés du système, en série de puissances de $\hbar$. A l'ordre zéro en $\hbar$ on obtient l'approximation de *Thomas Fermi* et la prise en compte des termes supérieurs en $\hbar$ porte le nom du modèle de *Thomas-Fermi* étendu [41]. Dans notre travail on utilise la méthode *semi-classique* pour donner une expression analytique de la matrice densité réduite d'ordre un. Ce développement *semi-classique* en série de puissances de $\hbar$ peut être obtenu par diverses méthodes. Citons parmi elles, le développement de *Wigner Kirkwood* utilisant l'opérateur de *Bloch* $e^{-\beta\hat{H}}$ [10], le développement en gradient de *Kirzhnits* [11] et le développement de *Grammaticos et Voros* [12] que nous allons utiliser dans ce travail .

Considérons un système de N fermions non interagissants avec masse effective dépendante de la position $m^*(x)$ confiné par un potentiel $V(x)$. L'Hamiltonien à un corps est donnée par

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \frac{d}{dx} \right) + V(x) \right] \quad (3.1)$$

On introduit le rapport $f(x) = m/m^*(x)$, de la masse de particules libres m et $m^*(x)$, et l'équation (3.1) s'écrit comme

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \left(f(x) \frac{d}{dx} \right) + V(x) \right] \quad (3.2)$$

L'opérateur matrice densité associé à notre Hamiltonien est défini par

$$\hat{\rho} = \theta(E_F - \hat{H}) \quad (3.3)$$

où θ est la fonction saut de *Heaviside* qui permet de réduire la somme sur les états occupés uniquement. E_F est l'énergie de *Fermi* du système. En effet, cette définition de l'opérateur matrice densité correspond à des calculs effectués à température T nulle. Selon la statistique de *Fermi-Dirac*, la distribution des fermions est très particulière. Si nous sommes à une température de zéro Kelvin, toutes les énergies inférieures à l'énergie du niveau de Fermi E_F sont occupées avec une probabilité de 1, et les niveaux supérieurs avec probabilité nulle (l'énergie de Fermi est l'énergie du dernier état occupé). Cette occupation des niveaux d'énergies se traduit par la fonction de Heaviside $\theta(E_F - \varepsilon_i)$.

Pour obtenir le développement *semi-classique* en puissance de $\hbar$ de la matrice densité d'ordre un $\rho(x, x')$, nous considérons la méthode de *Grammaticos et Voros* [12], qui utilise les propriétés de la transformée de *Wigner*, en passant dans le système de coordonnées relatives et du centre de masse $X = \frac{(x+x')}{2}$ et $s = (x - x')$ respectivement. Cette technique algébrique utilise la transformation de *Wigner* pour générer un développement *semi-classique*. La transformée de *Wigner* $\rho_W(X, p)$ de la matrice densité réduite $\rho(x, x') = \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle$ est une fonction des variables de l'espace des phases (X, p) définie par

$$\rho_W(X, p) = \int_{-\infty}^{+\infty} ds \rho\left(X + \frac{s}{2}, X - \frac{s}{2}\right) \exp\left(\frac{-ip.s}{\hbar}\right) \quad (3.4)$$

qui n'est qu'une transformée de Fourier par rapport à la variable relative $s = (x - x')$ et coordonnée du centre de masse $X = \frac{(x+x')}{2}$. Ceci montre que les éléments de la matrice densité $\rho(x, x') = \rho\left(X + \frac{s}{2}, X - \frac{s}{2}\right)$ sont obtenus par la transformation de *Wigner* inverse, telle que

$$\rho(x, x') = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{(2\pi\hbar)} \rho_W(X, p) \exp\left(\frac{+ip.s}{\hbar}\right) \quad (3.5)$$

En prenant l'élément diagonal de cette dernière $[\rho(x) = \rho(x, x')]$, on obtient la densité de particule locale $\rho(x)$ à une dimension, soit

$$\rho(x) = \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)} \rho_W(x, p) \quad (3.6)$$

La méthode *semi-classique* que nous avons utilisé dans notre travail, consiste à développer la transformée de *Wigner* $\rho_W(X, p)$ en série de puissances de $\hbar$, jusqu'à l'ordre $\hbar^2$. Ce développement est obtenu par *Grammaticos* et *Voros* [12] et s'écrit comme

$$\rho_W(X, p) = \theta(E_F - H_{cl}) - \frac{1}{2}\varphi_2\delta'(H_{cl} - E_F) - \frac{1}{6}\varphi_3\delta''(H_{cl} - E_F) + O(\hbar^4), \quad (3.7)$$

Avec $H_{cl}(X, p) = \frac{1}{2m}f(X)p^2 + V(X)$ est l'Hamiltonien classique où la transformation de *Wigner* de l'opérateur quantique $\hat{H}$. Les fonctions $\varphi_2(X, p)$ et $\varphi_3(X, p)$ sont données à l'ordre $\hbar^2$, pour une masse effective variable à une dimension, par

$$\varphi_2(X, p) = \frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{p^2}{m} \left(\frac{df}{dX} \right)^2 - \frac{p^2}{2m} f \left(\frac{d^2f}{dX^2} \right) - f \left(\frac{d^2V}{dX^2} \right) \right] + O(\hbar^4), \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \varphi_3(X, p) = & -\frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{fp^2}{m^2} \left(-\frac{3}{4}p^2 \left(\frac{df}{dX} \right)^2 + \frac{fp^2}{2} \frac{d^2f}{dX^2} \right) \right] \\ & - \frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{1}{m} \left(f^2 p^2 \frac{d^2V}{dX^2} - fp^2 \frac{df}{dX} \frac{dV}{dX} \right) + f \left(\frac{dV}{dX} \right)^2 \right] + O(\hbar^4) \end{aligned} \quad (3.9)$$

Le calcul *semi-classique* de la matrice densité à un corps $\rho^{sc}(x, x')$ dans l'espace réel est obtenu en insérant la dernière formule (3.7) avec les expressions des fonctions $\varphi_2(X, p)$ et $\varphi_3(X, p)$ dans l'équation (3.5). A l'ordre $\hbar^2$, la matrice densité *semi-classiques* $\rho^{sc}(x, x')$ peut s'écrire comme la somme de trois termes, soit

$$\rho^{sc}(x, x') = A(x, x') + B(x, x') + C(x, x') \quad (3.10)$$

avec $A(x, x')$ la densité à l'ordre de *Thomas Fermi* et $B(x, x')$ et $C(x, x')$ sont les corrections

d'ordre $\hbar^2$. On les écrit comme,

$$A(x, x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-k_F}^{+k_F} dk \exp(iks) \theta(E_F - H_{cl}), \quad (3.11)$$

$$B(x, x') = \frac{1}{2\pi} \left(-\frac{\hbar^2}{8m^2} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left\{ \frac{f}{m} \left[\frac{1}{f} \left(\frac{df}{dX} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{d^2 f}{dX^2} \right] \hbar^2 k^2 - f \frac{d^2 V}{dX^2} \right\} \exp(iks) \delta'(H_{cl} - E_F) \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} C(x, x') = & \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar^2}{24m} \left\{ \frac{f \hbar^4}{2m^2} \left[f \frac{d^2 f}{dX^2} - \frac{3}{2} \left(\frac{df}{dX} \right)^2 \right] \int_{-\infty}^{+\infty} k^4 dk \exp(iks) \delta''(H_{cl} - E_F) \right\} \\ & + \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar^2}{24m} \left[\frac{f^2 \hbar^2}{m} \left(\frac{d^2 V}{dX^2} - \frac{1}{f} \frac{df}{dX} \frac{dV}{dX} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} k^2 dk \exp(iks) \delta''(H_{cl} - E_F) \right] \\ & + \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar^2}{24m} \left[f \left(\frac{dV}{dX} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp(iks) \delta''(H_{cl} - E_F) \right] \end{aligned} \quad (3.13)$$

où $k = p/\hbar$.

Pour évaluer ces intégrales on a besoin d'effectuer un changement de variable. En remplaçant par $H_{cl} = \frac{1}{2m} f(X) p^2 + V(X)$ dans l'expression de $\delta(H_{cl} - E_F)$, $\delta'(H_{cl} - E_F)$, $\delta''(H_{cl} - E_F)$ et en utilisant les propriétés de la fonction Delta $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$, et $\delta(g(x)) = \sum \frac{\delta(x-x_i)}{|g'(x_i)|}$ où x_i sont les solutions de la fonction $g(x)$; sachant que $\delta'(H_{cl} - E_F) = \frac{d\delta(H_{cl} - E_F)}{dH_{cl}}$ et $\delta''(H_{cl} - E_F) = \frac{d^2 \delta(H_{cl} - E_F)}{dH_{cl}^2}$, donc on peut réécrire les fonctions $\delta(H_{cl} - E_F)$, $\delta'(H_{cl} - E_F)$, $\delta''(H_{cl} - E_F)$ en terme de la variable k au lieu de la variable H_{cl} sous la forme suivante

$$\delta(H_{cl} - E_F) = \frac{m}{f \hbar^2 k_F} [\delta(k - k_F) + \delta(k + k_F)] \quad (3.14)$$

$$\frac{d\delta(H_{cl} - E_F)}{dH_{cl}} = \frac{m^2}{f^2 \hbar^4 k_F} \left[\frac{1}{k} \frac{d\delta(k - k_F)}{dk} + \frac{1}{k} \frac{d\delta(k + k_F)}{dk} \right] \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \delta(H_{cl} - E_F)}{dH_{cl}^2} = & \frac{m^3}{f^3 \hbar^6 k_F} \left[\frac{1}{k^2} \frac{d^2 \delta(k - k_F)}{dk^2} + \frac{1}{k^2} \frac{d^2 \delta(k + k_F)}{dk^2} \right. \\ & \left. - \frac{1}{k^3} \frac{d\delta(k - k_F)}{dk} - \frac{1}{k^3} \frac{d\delta(k + k_F)}{dk} \right] \end{aligned} \quad (3.16)$$

En y injectant les expressions (3.14), (3.15) et (3.16) et faisant le changement de variable

$k \longrightarrow -k$, nous pouvons réécrire les termes $B(x, x')$ et $C(x, x')$ sous la forme

$$B(x, x') = -\frac{m}{4\pi f k_F} \left(\frac{d^2 V}{dX^2} \right) \int_0^{+\infty} dk \left[\frac{\cos(ks)}{k} \delta'(k - k_F) \right] - \frac{1}{4\pi k_F} \left[\left(\frac{1}{f} \frac{df}{dX} \right)^2 - \frac{1}{2f} \frac{d^2 f}{dX^2} \right] \int_0^{+\infty} dk k \cos(ks) \delta'(k - k_F) \quad (3.17)$$

$$C(x, x') = \frac{m}{12\pi f \hbar^2 k_F} \left(\frac{d^2 V}{dX^2} - \frac{1}{f} \frac{df}{dX} \frac{dV}{dX} \right) \int_0^{+\infty} dk \left[\cos(ks) \delta''(k - k_F) - \frac{\cos(ks)}{k} \delta'(k - k_F) \right] - \frac{1}{24\pi k_F} \left[\frac{1}{f} \frac{d^2 f}{dX^2} - \frac{3}{2} \left(\frac{1}{f} \frac{df}{dX} \right)^2 \right] \int_0^{+\infty} dk \left[k^2 \cos(ks) \delta''(k - k_F) - k \cos(ks) \delta'(k - k_F) \right] + \frac{m^2}{12\pi f^2 \hbar^4 k_F} \left(\frac{dV}{dX} \right)^2 \int_0^{+\infty} dk \left[\frac{\cos(ks)}{k^2} \delta''(k - k_F) - \frac{\cos(ks)}{k^3} \delta'(k - k_F) \right] \quad (3.18)$$

En effectuant les intégrales sur k et en utilisant la propriété suivante $\int dr f(r) \delta^{(n)}(r - r_0) = (-1)^n f^{(n)}(r_0)$ nous obtenons après intégration les expressions des différents termes $A(x, x')$, $B(x, x')$ et $C(x, x')$

$$A(x, x') = \frac{2}{\pi} k_F \frac{\sin z}{z} \quad (3.19)$$

$$B(x, x') = \frac{m}{4\pi f \hbar^2 k_F^3} \left(\frac{d^2 V}{dX^2} \right) (z \sin z + \cos z) - \frac{1}{4\pi k_F} \left[\left(\frac{1}{f} \frac{df}{dX} \right)^2 - \frac{1}{2f} \frac{d^2 f}{dX^2} \right] (z \sin z - \cos z) \quad (3.20)$$

$$C(x, x') = \frac{1}{24\pi k_F} \left[\frac{1}{f} \frac{d^2 f}{dX^2} - \frac{3}{2} \left(\frac{1}{f} \frac{df}{dX} \right)^2 \right] (3 \cos z - 5z \sin z - z^2 \cos z) - \frac{m}{12\pi f \hbar^2 k_F^3} \left(\frac{d^2 V}{dX^2} - \frac{1}{f} \frac{df}{dX} \frac{dV}{dX} \right) (z \sin z + \cos z + z^2 \cos z) + \frac{m^2}{12\pi f^2 \hbar^4 k_F^5} \left(\frac{dV}{dX} \right)^2 (3z \sin z + 3 \cos z - z^2 \cos z), \quad (3.21)$$

Où $z = k_F s$ est le vecteur d'onde local de Fermi qui est défini par $k_F(X) = \sqrt{\frac{2m}{f \hbar^2} (E_F - V(X))}$.

Finalement, ayant obtenu les différents termes $A(x, x')$, $B(x, x')$ et $C(x, x')$, alors leur somme conduit au résultat *semi-classique* de la matrice densité réduite $\rho^{sc}(x, x') = A(x, x') + B(x, x') + C(x, x')$ pour une masse effective dépendante de la position. On obtient après arrangement des termes et insertion du facteur g de la dégénérescence en spin, l'expression *semi-classique*

de la matrice densité d'ordre un à $1d$

$$\begin{aligned}
\rho^{sc}(x, x') = g & \left[\frac{1}{\pi} k_F \frac{\sin z}{z} + \frac{m}{12\pi f \hbar^2 k_F^3} \left(z \sin z + \cos z - \frac{z^2}{2} \cos z \right) \left(\frac{d^2 V}{dX^2} \right) \right. \\
& + \frac{m^2}{24\pi f^2 \hbar^4 k_F^5} (3z \sin z + 3 \cos z - z^2 \cos z) \left(\frac{dV}{dX} \right)^2 \\
& + \frac{m}{24\pi f \hbar^2 k_F^3} (z^2 \cos z + z \sin z + \cos z) \left(\frac{1}{f} \frac{df}{dX} \frac{dV}{dX} \right) \\
& + \frac{1}{32\pi k_F} (z \sin z + \cos z + z^2 \cos z) \left(\frac{1}{f} \frac{df}{dX} \right)^2 \\
& \left. - \frac{1}{24\pi k_F} \left(z \sin z + \frac{z^2}{2} \cos z \right) \left(\frac{1}{f} \frac{d^2 f}{dX^2} \right) \right] \quad (3.22)
\end{aligned}$$

Nous avons obtenu ainsi une autre expression *semi-classique* $\rho^{sc}(x, x')$ qui peut servir comme ingrédient dans le calcul de l'énergie de l'échange qui est un ingrédient essentiel dans une théorie de la *DFT* ainsi que dans l'approche de *HF*. On reconnaît dans l'expression $\rho^{sc}(x, x')$, que le 1^{er} terme est celui de *Thomas-Fermi*, les autres termes sont les corrections d'ordre 2 en $\hbar$ et les trois derniers termes représentent l'effet de la masse effective dépendante de la position.

Il est important de souligner que notre matrice densité obtenue par la méthode de *Grammaticos* et *Voros* est hermitique. En effet, puisque cette matrice est réelle, elle doit être symétrique dans la permutation des coordonnées x et x' . En faisons le changement de variable x par x' , la coordonnée du centre de masse $X = \frac{(x+x')}{2}$ reste inchangée, par contre la coordonnée relative $s = x - x'$ se transforme en $s \rightarrow -s$. Il est facile de voir que $\rho^{sc}(x, x')$ est une matrice hermitique car elle vérifie la relation suivante $\rho^{sc}(x', x) = \rho^{sc}(x, x')$.

Dans la suite nous allons effectuer quelques tests afin de s'assurer des résultats donnés par l'équation (3.22). Nous avons testé ce résultat *semi-classique* en retrouvant la densité d'énergie cinétique $\tau(x)$ à partir de la matrice densité $\rho^{sc}(x, x')$.

3.3 Quelques tests de la matrice densité *semi-classique*

3.3.1 Densité *semi-classique* de particule $\rho^{sc}(x)$

Comme un simple test que nous avons fait, est examiner la densité locale *semi-classique* $\rho^{sc}(x)$ en faisons la limite de $\rho^{sc}(x, x')$ lorsque $x = x' = X$, c'est-à-dire $s = 0$, on obtient le

résultat connu à une dimension de la densité locale $\rho^{sc}(x)$

$$\begin{aligned} \rho^{sc}(x) = \rho^{sc}(x, x) = & \frac{2}{\pi} k_F + \frac{m}{6\pi f \hbar^2} \frac{1}{k_F^3} \left(\frac{d^2 V}{dx^2} \right) + \frac{m^2}{4\pi f^2 \hbar^4} \frac{1}{k_F^5} \left(\frac{dV}{dx} \right)^2 - \\ & + \frac{1}{16\pi k_F} \left(\frac{1}{f} \frac{df}{dx} \right)^2 + \frac{m}{12\pi f \hbar^2} \frac{1}{k_F^3} \left(\frac{1}{f} \frac{df}{dx} \frac{dV}{dx} \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Ce résultat *semi-classique* ci-dessus est identique à celui déjà obtenu dans la littérature (voir équation (9) dans la référence [24]).

3.3.2 Fonctionnelle semi-classique de la densité d'énergie cinétique

$$\tau(\rho)$$

Le second test que nous avons fait pour s'assurer de notre résultat, examine la non-localité de la matrice densité $\rho^{sc}(x, x')$. Nous avons retrouvé la fonctionnelle *semi-classique* de la densité d'énergie cinétique $\tau^{sc}(\rho)$ du système.

Soit $\varphi_j(x)$ les fonctions d'onde à une particule de l'hamiltonien donnée par l'équation (3.1) ou (3.2). Pour un système de N fermions indépendants avec masse effective dépendante de la position $m^*(x)$, la matrice densité exacte est donnée par

$$\rho(x, x') = \sum_{j=1}^N \varphi_j(x) \varphi_j^*(x') \quad (3.24)$$

et la densité d'énergie cinétique exacte associée au système constitué de N fermions indépendants avec masse effective dépendante de la position est obtenue à partir des fonctions d'onde à une particule $\varphi_j(x)$ comme

$$\tau(x) = \frac{\hbar^2}{2m^*(x)} \sum_{j=1}^N \left| \frac{d\varphi_j(x)}{dx} \right|^2 \quad (3.25)$$

Ecrivons l'équation (3.25) comme

$$\tau(x) = \frac{\hbar^2}{2m^*(x)} \sum_{j=1}^N \left[\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x'} (\varphi_j(x) \varphi_j^*(x')) \right]_{x=x'} \quad (3.26)$$

Alors la densité d'énergie cinétique $\tau(x)$ s'écrit en fonction de la matrice densité réduite $\rho(x, x')$

$$\tau(x) = \frac{\hbar^2}{2m^*(x)} \left[\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x'} \rho(x, x') \right]_{x=x'}, \quad (3.27)$$

$$\tau(x) = \frac{\hbar^2}{2m} f(x) \left[\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x'} \rho(x, x') \right]_{x=x'}, \quad (3.28)$$

Si on utilise la relation (2.26) et en notant en même temps que $\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x'} = \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\partial^2}{\partial s^2}$, alors on obtient une relation exacte entre la densité d'énergie cinétique $\tau(x)$ et la matrice densité réduite $\rho(x, x')$ du système avec masse effective variable

$$\tau(x) = \frac{\hbar^2}{2m} f(x) \left[\left(\frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\partial^2}{\partial s^2} \right) \rho(X + s/2, X - s/2) \right]_{s=0}, \quad (3.29)$$

$$\tau(x) = \frac{\hbar^2}{8m} f(x) \frac{d^2 \rho}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m} f(x) \left[\frac{\partial^2}{\partial s^2} \rho(X + s/2, X - s/2) \right]_{s=0}, \quad (3.30)$$

Notons que cette expression de la densité d'énergie cinétique à une dimension est exacte et pour retrouver le résultat *semi-classique* $\tau^{sc}(x)$, on doit utiliser l'équation (2.21). Si nous faisons le changement de variable $z = k_F s$, nous pouvons réécrire l'expression *semi-classique* de la densité d'énergie cinétique de la manière suivante

$$\begin{aligned} \tau^{sc}(x) = & \frac{\hbar^2}{8m} f \left(\frac{d^2 \rho}{dx^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} f \left[\frac{2}{3\pi} k_F^3 - \frac{3k_F}{16\pi f^2} \left(\frac{df}{dx} \right)^2 + \frac{k_F}{4\pi f} \left(\frac{d^2 f}{dx^2} \right) \right. \\ & \left. - \frac{m}{4\pi \hbar^2 k_F f^2} \left(\frac{df}{dx} \right) \left(\frac{dV}{dx} \right) - \frac{m^2}{12\pi \hbar^4 k_F^3 f^2} \left(\frac{dV}{dx} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Sachant qu'on a utilisé les différentes limites ci-dessous

$$\begin{aligned} \lim_{z=0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \frac{\sin(z)}{z} &= -\frac{1}{3} \\ \lim_{z=0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} (z^2 \cos z + 2z \sin z) &= 6 \\ \lim_{z=0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} (z^2 \cos z + z \sin z + \cos z) &= 3 \\ \lim_{z=0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} (3z \sin z + 3 \cos z - z^2 \cos z) &= 1 \\ \lim_{z=0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} (2z \sin z + 2 \cos z - z^2 \cos z) &= 0 \end{aligned}$$

Maintenant, pour calculer l'expression *semi-classique* de la fonctionnelle $\tau(\rho(x))$, il est possible d'éliminer k_F ci-dessus et exprimer $\tau(x)$ en fonction de la densité et de ses dérivées. Cette procédure d'élimination est bien connue et il suffit de suivre l'ordre souhaité en $\hbar$, c'est un développement de puissance en série de $\hbar$ jusqu'à l'ordre $\hbar^2$. Pour le faire on procède ainsi.

Tout d'abord, nous inversons Eq. (2.22) pour obtenir k_F à l'ordre $\hbar^2$

$$\begin{aligned} \frac{2k_F}{\pi} = \rho - \frac{1}{8\pi^2\rho f^2} \left(\frac{df}{dx} \right)^2 + \frac{4m}{3\pi^4\hbar^2\rho^3 f} \left(\frac{d^2V}{dx^2} \right) \\ + \frac{2m}{3\pi^4\hbar^2\rho^3 f^2} \left(\frac{df}{dx} \right) \left(\frac{dV}{dx} \right) + \frac{8m^2}{\pi^6\hbar^4\rho^5 f^2} \left(\frac{dV}{dx} \right)^2 \end{aligned} \quad (3.32)$$

Tenant compte du fait que les termes qui contiennent k_F sont d'ordre $\hbar^2$ il suffit alors de remplacer k_F en fonction de la densité ρ à l'ordre le plus bas c'est-à-dire à l'ordre $\hbar^0$ sinon on aurait des termes en $\hbar^4$ qui ne sont pas considérés dans ce travail. Nous remplaçons le terme *Thomas-Fermi* d'ordre zéro en $\hbar$ qui est $\frac{2}{3\pi}k_f^3$ dans l'équation (2.25) par son expression (2.26) obtenue jusqu'à l'ordre $\hbar^2$. Par contre, nous remplaçons $\frac{dV}{dx}$, $\frac{d^2V}{dx^2}$ et $\left(\frac{dV}{dx}\right)^2$ par leurs expressions obtenues à l'ordre zéro car ils sont affectés des coefficients $\hbar^2$. Partant de l'expression de la matrice densité de *Thomas-Fermi* $\rho^{TF} = \frac{2k_F}{\pi}$ et en éliminons le potentiel V dans (2.26) à travers l'utilisation de la relation $\frac{\hbar^2 f}{2m} k_F^2 + V = E_F$, on en déduit

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dx} &= -\frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \left(\frac{df}{dx} \right) \rho^2 - \frac{\pi^2\hbar^2}{4m} f \rho \frac{d\rho}{dx}, \\ \left(\frac{dV}{dx} \right)^2 &= \frac{\pi^4\hbar^4}{64m^2} \left(\frac{df}{dx} \right)^2 \rho^4 + \frac{\pi^4\hbar^4 f}{16m^2} \left(\frac{df}{dx} \right) \left(\frac{d\rho}{dx} \right) \rho^3 + \frac{\pi^4\hbar^4 f}{16m} \left(\frac{d\rho}{dx} \right)^2 \rho^2 \\ \frac{d^2V}{dx^2} &= -\frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \left(\frac{d^2f}{dx^2} \right) \rho^2 - \frac{\pi^2\hbar^2}{2m} \left(\frac{df}{dx} \right) \left(\frac{d\rho}{dx} \right) \rho \\ &\quad - \frac{\pi^2\hbar^2}{4m} f \rho \left(\frac{d^2\rho}{dx^2} \right) - \frac{\pi^2\hbar^2}{4m} f \left(\frac{d\rho}{dx} \right)^2 \end{aligned} \quad (3.33)$$

D'où l'on déduit après arrangement des termes, l'expression *semi-classique* de la fonctionnelle $\tau(\rho(x))$ obtenue à l'ordre $\hbar^2$

$$\begin{aligned} \tau^{sc}(\rho(x)) &= \frac{\hbar^2}{2m} f \left[\frac{\pi^2}{12} \rho^3(x) + \frac{1}{3} \frac{d^2\rho}{dx^2} - \frac{1}{12\rho} \left(\frac{d\rho}{dx} \right)^2 + \frac{1}{6f} \left(\frac{df}{dx} \right) \left(\frac{d\rho}{dx} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{12f^2} \left(\frac{df}{dx} \right)^2 \rho(x) + \frac{1}{6f} \left(\frac{d^2f}{dx^2} \right) \rho(x) \right]. \end{aligned} \quad (2.28)$$

En faisant une simple manipulation (en utilisant $f(x) = m/m^*(x)$, $\frac{df}{dx} = -(m/m^{*2}) \left(\frac{dm^*}{dx} \right)$, et $\frac{d^2f}{dx^2} = -(m/m^{*2}) \left(\frac{d^2m^*}{dx^2} \right) + 2(m/m^{*3}) \left(\frac{dm^*}{dx} \right)^2$), on retrouve enfin le résultat *semi-classique* de la fonctionnelle $\tau^{sc}(\rho(x))$ d'un système de N fermions indépendants avec masse effective dépendante de la position $m^*(x)$

$$\begin{aligned} \tau^{sc}(\rho(x)) = \frac{\hbar^2}{2m^*(x)} & \left[\frac{\pi^2}{12} \rho^3(x) + \frac{1}{3} \left(\frac{d^2 \rho}{dx^2} \right) - \frac{1}{12\rho(x)} \left(\frac{d\rho}{dx} \right)^2 - \frac{1}{6m^*(x)} \left(\frac{d\rho}{dx} \right) \left(\frac{dm^*}{dx} \right) \right. \\ & \left. + \frac{\rho(x)}{4m^{*2}(x)} \left(\frac{dm^*}{dx} \right)^2 - \frac{\rho(x)}{6m^*(x)} \left(\frac{d^2 m^*}{dx^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.34)$$

On note déjà à ce niveau que le résultat établi est identique à celui déjà obtenu dans la littérature par la technique de la transformation canonique du point *PCT* [24], qui a été utilisée pour résoudre l'équation de *Schrödinger* avec masse variable. Elle consiste à transformer l'équation de *Schrödinger* avec la distribution spatiale de la masse $m^*(x) = \frac{m}{f(x)}$ en une équation de *Schrödinger* avec masse constante m .

On note aussi, que ce résultat est une bonne manière de s'assurer que nous avons établi la bonne expression analytique de la matrice densité réduite *semi-classique* $\rho^{sc}(x, x')$ d'un système de N fermions indépendants avec masse effective dépendante de la position $m^*(x)$ obtenue jusqu'à l'ordre $\hbar^2$. Nous allons étendre un tel calcul pour une masse constante pour $d = 1, 2, 3, 4$

3.4 Généralisation de la matrice densité semi-classique à $d = 1, 2, 3, 4$

La généralisation de cette étude à un système de fermions indépendant, dans l'espace $d = 1, 2, 3, 4$ dimensions exige la connaissance de la matrice densité réduite d'ordre un correspondante. Dans cette section et pour une masse constante, nous pouvons montrer qu'il est possible de réécrire une expression analytique générale de la matrice densité réduite d'ordre un pour une dimension arbitraire d .

Nous commençons par le cas d'un confinement en deux dimensions ($d = 2$). La matrice densité *semi-classique* correspondante obtenue jusqu'à l'ordre de $\hbar^2$ a été calculée, par les auteurs de la référence [16] [voir Eq. (29) de la référence [16]], elle s'écrit

$$\begin{aligned} \rho_{d=2}(\vec{r}, \vec{r}') = g & \left\{ \frac{k_F^2}{(2\pi)} \frac{J_1(z)}{z} - \frac{z J_1(z)}{(2\pi)} \frac{(\vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 k_F^2)}{24k_F^2} + \frac{z^2 J_2(z)}{(2\pi)} \frac{(\vec{\nabla}_{\vec{R}} k_F^2)^2}{96k_F^4} + \right. \\ & \left. \frac{z^2 J_0(z)}{(2\pi)} \frac{1}{48k_F^2} \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} \cdot \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} k_F^2 \cdot \frac{\vec{s}}{s} \right) \frac{\vec{s}}{s} \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.35)$$

où nous avons utilisé les mêmes notations de la référence [16]. Dans l'équation (3.35), g désigne le facteur de la dégénérescence de spin, $z = k_F |\vec{s}|$ avec $k_F(\vec{R}) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(E_F - V(\vec{R}))}$ est le vecteur d'onde local de *Fermi* et $J_\nu(z)$ sont les fonctions de *Bessel* cylindriques du ν^{eme} ordre.

Dans la référence [15], *Bencheikh* et all ont obtenu le développement *semi-classique* en série de puissances de $\hbar$ de la matrice densité réduite d'ordre un pour un système de N fermions indépendants confinés dans un espace à trois dimensions $3d$. Des calculs et utilisations de cette matrice densité réduite d'ordre un pour des systèmes physiques obtenu à trois dimensions ont été l'objet de plusieurs travaux [29, 15]. Ce développement en série de puissances de $\hbar$ pour un espace à $3d$ obtenue par *Gross* et *Dreizler* utilisant la méthode *semi-classique* de *Kirzhnits* [11], donne, malheureusement, une expression finale de la matrice densité $\rho_{d=3}(\vec{r}, \vec{r}')$ qui n'est pas hermitique. En effet, pour remédier à ce défaut, *Bencheikh* et all ont utilisé la méthode *semi-classique* de *Grammaticos* et *Voros*, afin d'établir une expression hermitique qui ne présente pas le défaut contenu dans celle de *Kirzhnits*. La matrice densité *semi-classique* correspondante obtenue jusqu'à l'ordre $\hbar^2$ prend la forme suivante [voir Eq. (33) de la référence [15]]

$$\rho_{d=3}(\vec{r}, \vec{r}') = g \left\{ \frac{k_F^3}{2\pi^2} \frac{j_1(z)}{z} + [j_0(z) - zj_1(z)] \frac{(\vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 k_F^2)}{48\pi^2 k_F} - [(1+z^2)j_0(z) - zj_1(z)] \frac{(\vec{\nabla}_{\vec{R}} k_F^2)^2}{192\pi^2 k_F^3} + [z^2 j_0(z)] \frac{1}{96\pi^2 k_F} \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} \cdot \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} k_F^2 \cdot \frac{\vec{s}}{s} \right) \frac{\vec{s}}{s} \right) \right\} \quad (3.36)$$

Où les $j_n(z)$ sont les fonctions de *Bessel* sphérique du n^{eme} ordre [43].

Afin de comparer nos expressions *semi-classique* de la matrice densité réduite d'ordre un $\rho_{d=3}(\vec{r}, \vec{r}')$ avec celle de $\rho_{d=2}(\vec{r}, \vec{r}')$, nous allons exprimer (3.22) en fonction des fonctions de *Bessel* cylindrique. Sachant que la fonction de *Bessel* sphérique d'ordre zéro est $j_0(z) = \sin(z)/z$, et si on utilise la relation $j_1(z) = -\frac{dj_0(z)}{dz} = (\sin z - z \cos z)/z^2$, on peut facilement vérifier que

$$(1+z^2)j_0(z) - zj_1(z) = \cos z + z \sin z \quad (3.37)$$

$$j_0(z) - zj_1(z) = \cos z \quad (3.38)$$

et compte tenu des définitions de $J_{1/2}(z) = \sqrt{2/(\pi z)} \sin z$ et $J_{-1/2}(z) = \sqrt{2/(\pi z)} \cos z$ [43], on

aboutit à

$$j_1(z) = \frac{1}{z^{3/2}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} [J_{1/2}(z) - zJ_{-1/2}(z)] \quad (3.39)$$

$$(1 + z^2) j_0(z) - zj_1(z) = \sqrt{\frac{\pi z}{2}} [J_{-1/2}(z) + zJ_{1/2}(z)] \quad (3.40)$$

$$j_0(z) - zj_1(z) = \sqrt{\frac{\pi z}{2}} J_{-1/2}(z) \quad (3.41)$$

En effet, à partir de la relation de récurrence [43], $J_{\nu-1}(z) + J_{\nu+1}(z) = (2\nu/z)J_\nu(z)$ pour $\nu = -1/2$ et $\nu = 1/2$, on trouve les deux relations $J_{-1/2}(z) + zJ_{-1/2}(z) = -zJ_{-3/2}(z)$ et $J_{1/2}(z) - zJ_{-1/2}(z) = J_{3/2}(z)$. Ce qui permet d'écrire $j_1(z)$ comme

$$j_1(z) = \frac{1}{z^{1/2}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} J_{3/2}(z) \quad (3.42)$$

$$(1 + z^2) j_0(z) - zj_1(z) = -z^{3/2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} J_{-3/2}(z) \quad (3.43)$$

Maintenant, en insérant les deux relations ci-dessus avec l'équation (3.41) dans l'expression (3.36), nous obtenons l'expression finale de la matrice densité réduite d'ordre un

$$\begin{aligned} \rho_{d=3}(\vec{r}, \vec{r}') = g \left\{ \frac{k_F^3}{(2\pi)^{3/2}} \frac{J_{3/2}(z)}{z^{3/2}} + \frac{z^{1/2} J_{-1/2}(z)}{(2\pi)^{3/2}} \frac{(\vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 k_F^2)}{24k_F} + \frac{z^{3/2} J_{-3/2}(z)}{(2\pi)^{3/2}} \frac{(\vec{\nabla}_{\vec{R}} k_F^2)^2}{96k_F^3} + \right. \\ \left. + \frac{z^{3/2} J_{1/2}(z)}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{48k_F} \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} \cdot \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} k_F^2 \cdot \frac{\vec{s}}{s} \right) \frac{\vec{s}}{s} \right) \right\} \quad (3.44) \end{aligned}$$

Chercher une relation générale de la matrice densité réduite $\rho_d(\vec{r}, \vec{r}')$ va nous permettre de clarifier plus l'expression $\rho_{d=1}(x, x')$. Pour cela, nous rappelons l'expression de la matrice densité *semi-classique* obtenue précédemment dans l'équation (3.22) pour une masse constante $f(x) = 1$

$$\begin{aligned} \rho_{d=1}(x, x') = g \left\{ \frac{1}{\pi} k_F \frac{\sin z}{z} + \frac{m}{12\pi\hbar^2 k_F^3} \left[z \sin z + \cos z - \frac{z^2}{2} \cos z \right] \left(\frac{d^2 V}{dX^2} \right) + \right. \\ \left. \frac{m^2}{24\pi\hbar^4 k_F^5} [3z \sin z + 3 \cos z - z^2 \cos z] \left(\frac{dV}{dX} \right)^2 \right\} \quad (3.45) \end{aligned}$$

Pour faire apparaître la même forme d'écriture que celle obtenue pour $d = 2$ et $d = 3$, nous devons les exprimer en fonction des fonctions de *Bessel* cylindriques et du moment de Fermi k_F . On élimine d'abord le potentiel V et ces gradients dans l'équation (3.45) à travers l'utilisation

de la relation $\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + E_F = V$ et de leurs gradients $dV/dx = -\hbar^2 (dk_F^2/dx)/(2m)$ et $d^2V/dx^2 = -\hbar^2 (d^2k_F^2/dx^2)/(2m)$. Ensuite, en exprimant, $z \sin z$, $\cos z$ et $z^2 \cos z$ en fonction des fonctions de *Bessel* cylindriques. Une simple manipulation nous mène à réécrire $\rho_{d=1}(x, x')$

$$\rho_{d=1}(x, x') = g \left\{ \frac{k_F}{(2\pi)^{1/2}} \frac{J_{\frac{1}{2}}(z)}{z^{\frac{1}{2}}} + \frac{z^{3/2} J_{-3/2}(z)}{(2\pi)^{1/2}} \frac{(\vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 k_F^2)}{24k_F^3} + \frac{z^{5/2} J_{-5/2}(z)}{(2\pi)^{1/2}} \frac{(\vec{\nabla}_{\vec{R}} k_F^2)^2}{96k_F^5} + \frac{z^{5/2} J_{-1/2}(z)}{(2\pi)^{1/2}} \frac{1}{48k_F^3} \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} \cdot \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} k_F^2 \cdot \frac{\vec{s}}{s} \right) \frac{\vec{s}}{s} \right) \right\} \quad (3.46)$$

Notons que, dans l'équation (3.46) il y a un terme supplémentaire proportionnel à $\left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} \cdot \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} k_F^2 \cdot \frac{\vec{s}}{s} \right) \frac{\vec{s}}{s} \right)$ qui n'est pas présent dans l'équation (3.45). En fait, à une dimension, on peut facilement montrer que ce terme est proportionnel à $(\vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 k_F^2)$ et qu'il se combine avec le deuxième terme de l'équation (3.46). Alors, il est intéressant de noter que les expressions données respectivement dans les équations (3.35), (3.44) et (3.46) peuvent être écrites en termes de dimensionnalité $d = 1, 2, 3$ de l'espace comme suit [18]

$$\rho_d(\vec{r}, \vec{r}') = g \left\{ \frac{k_F^d}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \frac{J_{\frac{d}{2}}(z)}{z^{d/2}} + \frac{z^{2-\frac{d}{2}} J_{(\frac{d}{2}-2)}(z)}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \frac{(\vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 k_F^2)}{24k_F^{4-d}} + \frac{z^{3-\frac{d}{2}} J_{(\frac{d}{2}-3)}(z)}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \frac{(\vec{\nabla}_{\vec{R}} k_F^2)^2}{96k_F^{6-d}} + \frac{z^{3-\frac{d}{2}} J_{(\frac{d}{2}-1)}(z)}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \frac{1}{48k_F^{4-d}} \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} \cdot \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} k_F^2 \cdot \frac{\vec{s}}{s} \right) \frac{\vec{s}}{s} \right) \right\} \quad (3.47)$$

Nous avons utilisé la propriété $J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z)$ satisfaite par les fonctions de *Bessel* avec indice entier.

Ce résultat est tout à fait imprévisible. Nous avons vérifié que cette invariance de forme concernant ces termes, reste vraie aussi si on fait un calcul *semi-classique* en dimension $d = 4$. Nous pensons que ce résultat est valable pour d quelconque. Nous présentons dans ce qui suit, un bref aperçu sur le calcul de la matrice densité réduite à $4d$. Le détail de ce calcul est présenté dans l'appendice A.

On note que pour $d = 4$, l'intégration sur le moment p s'effectue de la même manière que pour les dimensions inférieures en utilisant les coordonnées sphériques dans l'espace des moment. Ici, l'ensemble des coordonnées sphériques sont notées par $(p, \theta_1, \theta_2, \theta_3)$ avec p le module du moment $\vec{p}$ et $0 \leq \theta_1 \leq \pi$, $0 \leq \theta_2 \leq \pi$, $0 \leq \theta_3 \leq 2\pi$. Ces coordonnées sont liées aux coordonnées cartésiennes $p_{i=1,2,3,4}$ de $\vec{p}$ par $p_1 = p \cos(\theta_1)$, $p_2 = p \sin(\theta_1) \cos(\theta_2)$, $p_3 =$

$p \sin(\theta_1) \sin(\theta_2) \cos(\theta_3)$ et $p_4 = p \sin(\theta_1) \sin(\theta_2) \sin(\theta_3)$ et on rappelle que le volume élémentaire dans l'espace de moment à $d = 4$ est $d^4p = p^3 \sin^2(\theta_1) \sin(\theta_2) dp d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3$.

En faisant quelques développements et manipulations juste comme nous avons fait pour les cas $d = 1$ et $d = 2$, la matrice densité réduite $\rho_{d=4}(\vec{r}, \vec{r}')$ s'écrit alors à 4d comme

$$\begin{aligned} \rho_{d=4}(\vec{r}, \vec{r}') = g \left\{ \frac{k_f^4}{(2\pi)^2} \frac{J_2(z)}{z^2} + \frac{1}{96\pi^2} J_0(z) \left(\vec{\nabla}_R^2 k_f^2 \right) + \right. \\ \left. \frac{1}{96 \cdot 2 \cdot \pi^2} \left(\vec{\nabla}_R \left(\vec{\nabla}_R k_f^2 \cdot \frac{\vec{s}}{s} \right) \cdot \frac{\vec{s}}{s} \right) z J_1(z) - \frac{1}{96 (2\pi)^2} z J_1(z) \frac{\left(\vec{\nabla}_R k_f^2 \right)^2}{k_f^2} \right\} \end{aligned} \quad (3.48)$$

Notre expression est valable à $d = 1, 2, 3, 4$ dimensions.

Nous donnerons dans la section suivante une comparaison numérique entre la matrice densité d'ordre un *semi-classique* et celle obtenue exactement.

3.5 Résultats numériques

Nous présentons dans cette partie une comparaison entre la matrice densité exacte et celle calculée par la méthode *semi-classique*, pour le cas d'un système de N fermions confinés dans un potentiel d'oscillateur harmonique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega x^2$, avec une masse constante. On compare numériquement, la densité *semi-classique* obtenue (3.45) avec celle calculée par les auteurs de la référence en utilisant une méthode exacte [[42] (Eq.(20))].

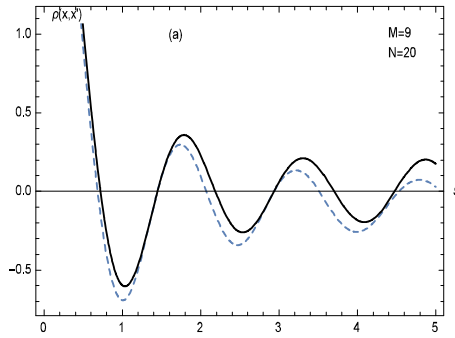
$$\rho^{exact}\left(X + \frac{s}{2}, X - \frac{s}{2}\right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^M (-1)^n L_n^{-\frac{1}{2}}(2X^2) L_{M-n}^{\frac{1}{2}}\left(\frac{s^2}{2}\right) \exp\left(-\left(X^2 + \frac{s^2}{4}\right)\right) \quad (3.49)$$

où $L_n^{\frac{1}{2}}(x)$ et $L_{M-n}^{\frac{1}{2}}(x)$ sont les polynômes de *Laguerre* associés.

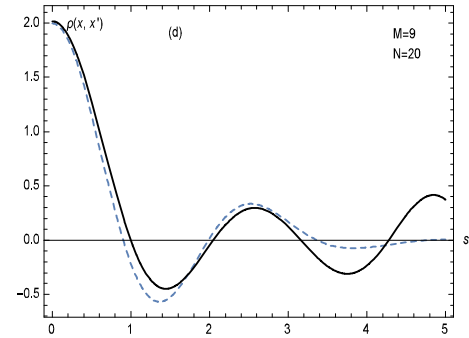
Les résultats obtenus pour différents nombres de particules $N = 20$, $N = 50$, $N = 100$ qui occupent $M + 1$ couches sont présentés sur la figure (3.1). On remarque les points suivants : en variant le nombre de particules de $N = 50$ à $N = 100$. L'allure de la densité *semi-classique* $\rho^{sc}(\vec{r}, \vec{r}')$ devient de plus en plus proche de celle de la densité exacte $\rho^{exact}(\vec{r}, \vec{r}')$. Pour les faibles nombres de particules c'est-à-dire pour $N = 20$, la présence d'oscillations dans la densité locale exacte, qui sont le résultat d'effets de couches, sont absente dans l'approche *semi-classique*.

On observe aussi pour $N = 50$, $N = 100$ que l'allure de la densité *semi-classique* devient de plus en plus proche de celle du résultat exacte et les oscillations sont plus prononcées au centre qu'à la surface. Un comportement similaire est observé pour d'autres valeurs de r , illustrant clairement que même à des nombres de particules modérés, la (*LDA*) est une bonne description de la matrice densité $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$, en fonction des coordonnées relatives. Au point tournant, la densité *semi-classique* s'annule

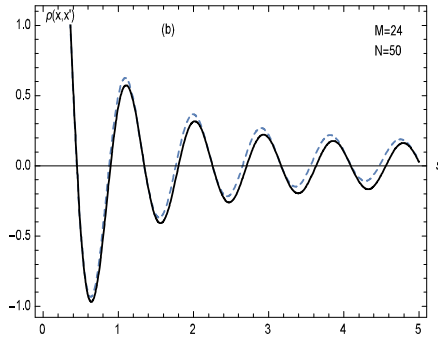
En résumé, pour des systèmes à petit nombre de particules, des oscillations sont présentés et fortement marquées dans la densité locale exacte. Cependant, en augmentant le nombre de particules, ces effets de couches diminuent et l'allure de la densité *semi-classique* s'approche de celle calculée exactement. Donc, l'approximation *semi-classique* est une excellente description de la matrice densité réduite du 1^{er} ordre à la limite où N est très grand. A cette limite la densité *semi-classique* devient semblable à celle exacte. Ce point a été déjà signalé par les auteurs de la référence [42]. Ce résultat souligne l'importance du calcul *semi-classique*.



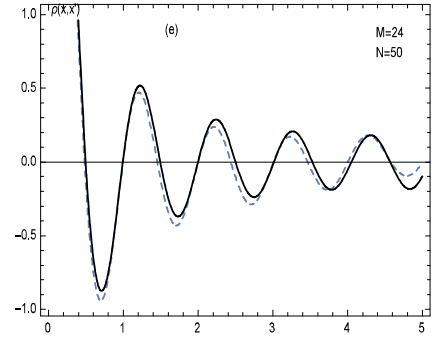
Comparaison entre les densités
exacte $\rho^{exact}(\vec{r}, \vec{r}')$ en courbe
pleine et semiclassique
 $\rho^{sc}(\vec{r}, \vec{r}')$ en courbe pointillée
pour $N = 20$ particules avec $X=0$



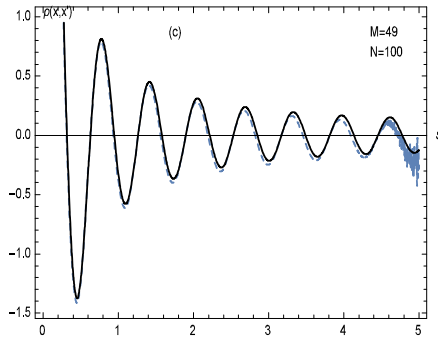
Comparaison entre les densités
exacte $\rho^{exact}(\vec{r}, \vec{r}')$ en courbe
pleine et semiclassique
 $\rho^{sc}(\vec{r}, \vec{r}')$ en courbe pointillée
pour $N = 20$ particules avec $X=3$



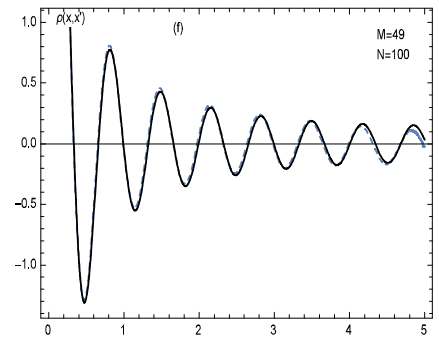
Comparaison entre les densités
exacte $\rho^{exact}(\vec{r}, \vec{r}')$ en courbe
pleine et semiclassique
 $\rho^{sc}(\vec{r}, \vec{r}')$ en courbe pointillée
pour $N = 50$ particules avec
 $X=0$



Comparaison entre les densités
exacte $\rho^{exact}(\vec{r}, \vec{r}')$ en courbe
pleine et semiclassique
 $\rho^{sc}(\vec{r}, \vec{r}')$ en courbe pointillée
pour $N = 50$ particules avec
 $X=3$



Comparaison entre les densités
exacte $\rho^{exact}(\vec{r}, \vec{r}')$ en courbe
pleine et semiclassique
 $\rho^{sc}(\vec{r}, \vec{r}')$ en courbe pointillée
pour $N = 100$ particules avec
 $X=0$



Comparaison entre les densités
exacte $\rho^{exact}(\vec{r}, \vec{r}')$ en courbe
pleine et semiclassique
 $\rho^{sc}(\vec{r}, \vec{r}')$ en courbe pointillée
pour $N = 100$ particules avec
 $X=3$

Chapitre 4

Matrice densité de *Bloch*

4.1 Introduction

Dans ce chapitre on présentera quelques résultats obtenus dans ce travail concernant la matrice densité canonique ou la matrice densité de *Bloch* $C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)$. Cette quantité présente un intérêt considérable comme un outil mathématique utile pour l'étude des propriétés statistiques des systèmes physiques constitués de N particules. En effet, l'importance physique de la matrice densité de *Bloch* vient du fait que sa connaissance conduit à la dérivation de la matrice densité réduite $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$, à travers une transformée de *Laplace* inverse. Ainsi, à partir de laquelle on peut déduire la densité locale, sa transformée de *Fourier* (appelée fonction de *Green*)...etc

On a remarqué qu'il existe un nombre réduit des travaux concernant le calcul exact de la matrice densité de *Bloch* avec masse variable. Ceci a constitué la principale motivation de ce travail où on a proposé le calcul de la matrice densité de *Bloch* de façon approchée (méthode *semi-classique*), et tout calcul analytique exacte [44], [45], doit se réduire à notre résultat si on fait un développement en série de puissances en $\hbar$. On a obtenu une expression *semi-classique* pour le propagateur pour un Hamiltonien à une particule incluant une masse spatialement variable. Des résultats numériques pour le cas d'une masse constante sont présentés.

Le présent chapitre est organisé comme suit. Dans la Sec. 1, nous utiliserons le développement semi-classique de la transformée de *Wigner* de la matrice densité de *Bloch* pour construire une expression semi-classique de la matrice densité de *Bloch* pour un système de fermions confi-

nès dans un espace à une dimension $d = 1$ avec une masse dépendante de la position. Ensuite nous présenterons dans la Sec 2 un bref aperçu concernant la matrice densité de *Bloch* exacte calculé pour un système de particules libres, et un autre confiné dans un potentiel d'oscillateur harmonique. Dans la Sec. 3, des résultats obtenus sont comparés à ceux obtenus exactement, ce qui nous permettra de situer certains aspects de la performance des calculs *semi-classiques*.

4.2 Formalisme de la matrice densité de Bloch $C(x, x'; \gamma)$

Pour calculer la matrice densité réduite pour un nombre de fermions N quelconque, on pourrait utiliser deux méthodes : la première utilise directement les fonctions d'ondes solutions de l'équation de *Schrödinger* qui s'est avéré difficile pour obtenir une expression compacte, et la seconde méthode est basé sur le formalisme de la matrice densité de *Bloch* appelée aussi propagateur de *Bloch*. On définit la matrice densité de *Bloch* par l'opérateur

$$C = \exp(-\gamma H) \quad (4.1)$$

A température zéro, et en représentation position, les éléments de la matrice s'écrivent

$$C(x, x'; \gamma) = \langle x | \exp(-\gamma H) | x' \rangle = \sum_j \varphi_j(x) \varphi_j(x') \exp(-\gamma \varepsilon_j) \quad (4.2)$$

où les $\varphi_j(x)$ sont les solutions normalisées de l'équation de *Schrödinger* indépendante du temps $H\varphi_j(x) = \varepsilon_j\varphi_j(x)$ avec les énergies propres ε_j . Dans cette définition, on considère le paramètre γ comme une variable mathématique complexe qui a pour dimension l'inverse d'une énergie et n'a rien à voir avec le paramètre défini en thermodynamique qui est égale à $\frac{1}{k_B T}$. Cette matrice densité de *Bloch* vérifie l'équation de *Bloch*

$$HC(x, x'; \gamma) = -\frac{\partial C(x, x'; \gamma)}{\partial \gamma} \quad (4.3)$$

avec la condition initiale $\gamma = 0$, $C(x, x'; 0) = \delta(x - x')$.

En utilisant les propriétés de la transformée de *Laplace*, on peut exprimer la fonction saut de Heaviside $\theta(x)$ comme une transformée de *Laplace* inverse [43]

$$\theta(u - H) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\gamma \frac{e^{\gamma(u-H)}}{\gamma}, \quad c > 0 \quad (4.4)$$

On note ici que l'intégration porte sur le paramètre complexe γ et si on introduit le potentiel chimique qui est ici le niveau de *Fermi* pour n'inclure que les états occupés, $u = E_F$, on obtient une relation exacte entre l'opérateur densité $\hat{\rho} = \theta(E_F - H)$ du système de particules sans interactions avec une énergie de *Fermi* E_F et le propagateur $e^{-\gamma H}$. Par conséquent on peut écrire une relation exacte entre les éléments de la matrice densité de *Bloch* BDM $C(x, x'; \gamma)$ et celle de la matrice densité $\rho(x, x'; E_F)$, soit

$$C(x, x'; \gamma) = \gamma \int_0^\infty dE_F e^{-\gamma E_F} \rho(x, x'; E_F) \quad (4.5)$$

En pratique, le calcul exact de la matrice densité de *Bloch* pour un potentiel $V(x)$ quelconque n'est pas connu et d'après la définition (4.5), il apparait que l'évaluation de cette matrice nécessite la connaissance de la matrice densité et par conséquent, une approximation *semi-classique* pour $\rho(x, x'; E_F)$ fournit une approximation correspondante pour $C(x, x'; \gamma)$. On obtient la matrice densité à partir de Eq. (4.5) *via* une transformation de *Laplace* inverse

$$\rho(x, x'; E_F) = -\frac{i}{2\pi} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\gamma \gamma^{-1} e^{-\gamma E_F} C(x, x'; \gamma) \quad (4.6)$$

Tenant compte du fait que la forme analytique de cette dernière n'est pas simple et dépend des coordonnées du centre de masse et relative, il est préférable de travailler dans l'espace des phases de *Wigner*. En effet pour effectuer la transformation de *Laplace* ci-dessus, il s'avère plus pratique de passer par la transformation de *Wigner*.

Commençons par écrire la transformée de *Wigner* de la matrice densité de *Bloch* en fonction de la transformée de *Wigner* de la matrice densité que nous avons étudié précédemment. L'écriture explicite de l'équation (4.5) dans l'espace des phases est

$$C_W(X, p; \gamma) = \mathcal{L}_\gamma [\gamma \rho_W(X, p)] \quad (4.7)$$

$$= \gamma \int_0^\infty dE_F e^{-\gamma E_F} \rho_W(X, p; E_F) \quad (4.8)$$

où $C_W(X, p; \gamma)$ signifie la transformée de *Wigner* de la matrice densité de *Bloch* $C(x, x'; \gamma)$

4.3 Calcul semi-classique de la Matrice densité de Bloch pour une masse effective dépendante de la position

Dans ce paragraphe, on va établir une expression analytique et *semi-classique* pour la matrice densité de *Bloch* pour une masse effective dépendante de la position. Pour cela nous allons utiliser l'approximation *semi-classique* en série de puissance de $\hbar$ jusqu'à l'ordre deux.

La démarche à suivre est la suivante. Nous allons retrouver une expression *semi-classique* pour la transformée de *Wigner* de la matrice densité de *Bloch*. Ensuite nous construisons une expression *semi-classique* de la matrice densité de *Bloch* $C^{sc}(x, x'; \gamma)$, en appliquant la transformation de *Wigner*. On propose donc d'utiliser la technique algébrique de *Grammaticos-Voros* pour établir l'expression de $C(x, x'; \gamma)$. On définit la transformée de *Wigner* $C_W(X, p; \gamma)$ de la matrice densité de *Bloch* $C(x, x'; \gamma)$ par

$$C_W(X, p; \gamma) = \int \frac{ds}{2\pi\hbar} e^{-\frac{ips}{\hbar}} C(x, x'; \gamma) \quad (4.9)$$

qui n'est qu'une transformée de *Fourier* par rapport à la variable relative $s = x - x'$ et $X = \frac{x+x'}{2}$ la coordonnée du centre de masse. Par conséquent la transformation de *Wigner* inverse s'écrit donc

$$C(x, x'; \gamma) = C\left(X + \frac{s}{2}, X - \frac{s}{2}\right) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{ips}{\hbar}\right) C_W(X, p; \gamma) \quad (4.10)$$

si $x = x'$ on obtient la matrice densité locale

$$C(x; \gamma) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} C_W(X, p; \gamma) \quad (4.11)$$

Ensuite nous allons calculer la transformée de *Wigner* $C_W(X, p; \gamma)$ à partir de la transformation de *Laplace*, en partant de la relation (4.8) qui exprime la matrice densité *Bloch* en fonction de la matrice densité d'ordre un. Une fois que le développement *semi-classique* de la transformée de *Wigner* de la matrice densité de *Bloch* $C_W^{sc}(X, p; \gamma)$ est connu, on peut maintenant construire une expression *semi-classique* de la matrice densité de *Bloch* $C^{sc}(x, x'; \gamma)$. En faisant la transformation de *Laplace* terme par terme du développement ainsi obtenu pour $\rho_W^{sc}(X, p; E_F)$, on arrive au développement *semi-classique* obtenu à l'ordre $\hbar^2$ pour $C_W^{sc}(X, p; \gamma)$

$$C_W^{sc}(X, p; \gamma) = \exp\left(-\gamma \frac{p^2}{2m} - \gamma V(X)\right) \left\{ 1 + \frac{\gamma^2}{2} \varphi_2 - \frac{\gamma^3}{6} \varphi_3 \right\} \quad (4.12)$$

Où nous avons utilisé la propriété suivante de la transformée de *Laplace* [57]

$$\int_0^\infty du e^{-\gamma u} [(u - V(x))^\nu \theta(u - V(x))] = \frac{\Gamma(\nu + 1)}{\gamma^{\nu+1}} e^{-\gamma V(x)} \quad (4.13)$$

Ainsi que les relations suivantes

$$\begin{aligned} \int_0^\infty du \theta(u - H_c) \exp(-\beta u) &= \frac{\exp(-\beta H_c)}{\beta} \\ \int_0^\infty du \delta'(u - H_c) \exp(-\beta u) &= -\beta \exp(-\beta H_c) \\ \int_0^\infty du \delta''(u - H_c) \exp(-\beta u) &= \beta^2 \exp(-\beta H_c) \end{aligned}$$

L'injection de (3.8), (3.9) et (4.13) dans (4.12), nous conduit à la forme suivante du développement *semi-classique* de la transformée de *Wigner* de la matrice densité de *Bloch* $C_W(X, p; \gamma)$

$$\begin{aligned} C_W^{sc}(X, p; \gamma) &= \exp\left(-\gamma \left(\frac{fp^2}{2m} + V(X)\right)\right) \times \\ &\left[1 + \frac{\hbar^2 f}{8m} \left\{ \gamma^2 \left[\frac{f}{m} \left(\left(\frac{1}{f} \frac{df}{dX} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{f} \frac{d^2 f}{dX^2} \right) \right) p^2 - \frac{d^2 V}{dX^2} \right] \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{\gamma^3}{3} \left[\frac{f}{2m} \left(\frac{d^2 f}{dX^2} - \frac{3}{2f} \left(\frac{df}{dX} \right)^2 \right) p^4 + \frac{f}{m} \left(\frac{d^2 V}{dX^2} - \frac{1}{f} \frac{df}{dX} \cdot \frac{dV}{dX} \right) p^2 + \left(\frac{dV}{dX} \right)^2 \right] \right\} \right] \end{aligned}$$

Pour une masse constante $f = 1$

$$\begin{aligned} C_W^{f=1}(X, p; \gamma) &= \exp\left[-\gamma \left(\frac{fp^2}{2m} + V(X)\right)\right] \\ &\times \left\{ 1 + \frac{\hbar^2}{8m} \left[-\gamma^2 \left(\frac{d^2 V}{dX^2} \right) + \frac{\gamma^3}{3} \left(\frac{dV}{dX} \right)^2 + \frac{\gamma^3}{3} p^2 \left(\frac{d^2 V}{dX^2} \right) \right] \right\}, \quad (4.14) \end{aligned}$$

Pour revenir à la matrice densité de *Bloch* $C^{sc}(x, x'; \gamma)$ dans l'espace réel, on applique la transformation de *Wigner*. Si on remplace l'équation ci-dessus dans (4.10) on peut donc écrire la matrice densité de *Bloch* comme une somme de deux contributions, soit

$$C^{sc}(x, x'; \gamma) = C^{TF}(x, x'; \gamma) + \delta C(x, x'; \gamma) \quad (4.15)$$

avec $C^{TF}(x, x'; \gamma)$ représente la contribution à l'ordre de *Thomas Fermi*, défini par

$$C^{TF}(x, x'; \gamma) = \frac{1}{2\pi} \int dk \exp(iks) \exp\left(-\gamma \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \gamma V(X)\right) \quad (4.16)$$

et $\delta C(x, x'; \gamma)$ est la correction d'ordre $\hbar^2$ qui peut s'écrire

$$\begin{aligned} \delta C(x, x'; \gamma) = & \frac{\exp(-\gamma V(X))}{(2\pi)} \int \frac{\hbar^2}{8m} \left[-\gamma^2 \frac{d^2 V}{dx^2} + \right. \\ & \left. \frac{\gamma^3}{3} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m} \frac{d^2 V}{dX^2} + \left(\frac{dV}{dX} \right)^2 \right) \right] dk \exp \left[iks - \gamma \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] \end{aligned} \quad (4.17)$$

En effectuant l'intégrale sur k et ensuite la propriété suivante

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{(-\alpha x^2 + icx)} dx = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n} \left[\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp \left(-\frac{c^2}{4\alpha} \right) \right] \quad (4.18)$$

on obtient le terme *Thomas-Fermi* du propagateur

$$C^{TF}(x, x'; \gamma) = \sqrt{\frac{m}{2\pi f \hbar^2 \gamma}} e^{-\gamma V(X)} e^{-\frac{ms^2}{2\gamma f \hbar^2}} \quad (4.19)$$

et on déduit alors la correction d'ordre $\hbar^2$, $\delta C(x, x'; \gamma)$ suivante

$$\begin{aligned} \delta C(x, x'; \gamma) = & \sqrt{\frac{\hbar^2 f}{16m\pi\gamma}} e^{-\gamma V(X)} e^{-\frac{ms^2}{2\gamma f \hbar^2}} \left\{ \left(\frac{1}{f} \frac{df}{dX} \right)^2 \frac{\gamma}{4} \right. \\ & + \left(2 \frac{d^2 V}{dX^2} - \frac{1}{f} \frac{df}{dX} \frac{dV}{dX} \right) \frac{\gamma^2}{3} + \left[\frac{1}{3} \left(\frac{d^2 V}{dX^2} - \frac{1}{f} \frac{df}{dX} \frac{dV}{dX} \right) \frac{ms^2}{f \hbar^2} \right. \\ & \left. \left. + \left(\frac{1}{f} \frac{d^2 f}{dX^2} - \left(\frac{1}{f} \frac{df}{dX} \right)^2 \right) \left(\frac{1}{2} \frac{m}{f \hbar^2} s^2 + \frac{m^2}{f^2 \hbar^4} s^4 \right) \right] \gamma^3 \right\} \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$+ \left(\frac{1}{f} \frac{d^2 f}{dX^2} - \left(\frac{1}{f} \frac{df}{dX} \right)^2 \right) \left(\frac{1}{2} \frac{m}{f \hbar^2} s^2 + \frac{m^2}{f^2 \hbar^4} s^4 \right) \gamma^3 \right\} \quad (4.21)$$

Par conséquent on obtient le résultat *semi-classique* final pour le propagateur de *Bloch* en fonctions des coordonnées relative et centre de masse

$$\begin{aligned} C^{sc}(x, x'; \gamma) = & \sqrt{\frac{m}{2\pi f \hbar^2 \gamma}} e^{-\gamma V(X)} e^{-\frac{ms^2}{2\gamma f \hbar^2}} \left\{ 1 + \frac{\hbar^2 f}{8m} \left[\left(\frac{1}{f} \frac{df}{dX} \right)^2 \frac{\gamma}{4} \right. \right. \\ & + \left(2 \frac{d^2 V}{dX^2} - \frac{1}{f} \frac{df}{dX} \frac{dV}{dX} \right) \frac{\gamma^2}{3} + \left[\frac{1}{3} \left(\frac{d^2 V}{dX^2} - \frac{1}{f} \frac{df}{dX} \frac{dV}{dX} \right) \frac{ms^2}{f \hbar^2} \right. \\ & \left. \left. + \left[\frac{1}{f} \frac{d^2 f}{dX^2} - \left(\frac{1}{f} \frac{df}{dX} \right)^2 \right] \left(\frac{1}{2} \frac{m}{f \hbar^2} s^2 + \frac{m^2}{f^2 \hbar^4} s^4 \right) \right] \gamma^3 \right\}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Où on a introduit le rapport $f(X) = m/m^*(X)$, de la masse de particules libres m et la masse effective $m^*(X)$. Dans la suite nous allons effectuer quelques tests afin d'avoir une bonne confiance de Eq. (4.22)

4.4 Test de la matrice densité de *Bloch* $C(x, x'; \gamma)$

4.4.1 Slater sum $C(x; \gamma)$

Tout d'abord, si $x = x'$ c'est-à-dire $s = 0$, on obtient la partie diagonale du propagateur de *Bloch* appelée 'Slater sum' $C(x, x; \gamma) = C(x, x'; \gamma)|_{x'=x}$ suivante

$$C(x; \gamma) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\gamma f \hbar^2}} \exp(-\gamma V(x)) \left[1 + \frac{\hbar^2 f}{24m} \left\{ \frac{3}{4} \left(\frac{1}{f} \frac{df}{dx} \right)^2 \gamma + \left[\left(-\frac{1}{f} \frac{df}{dx} \cdot \frac{dV}{dx} \right) - 2 \frac{d^2 V}{dx^2} \right] \gamma^2 + \left(\frac{dV}{dx} \right)^2 \gamma^3 \right\} \right] \quad (4.23)$$

On retrouve la même expression *semi-classique* de la partie diagonale du propagateur de *Bloch* donnée par Eq. (11) de la référence [58]. Il faut noter que l'expression de la matrice densité de *Bloch* obtenue par l'équation Eq. (4.22) est une généralisation du résultat obtenu par les auteurs de la référence [58], où dans cette dernière le paramètre γ est noté β . Ces auteurs ont obtenu une expression *semi-classique* du Slater sum pour un Hamiltonien à une particule incluant une masse spatialement variable dans l'espace à $d = 1, 2, 3, 4$ dimensions.

4.4.2 Développement en série de puissances en $\hbar$ d'un calcul exact

Le second test que nous voulons faire examiner la limite d'un résultat exact au voisinage de la valeur $\hbar$ pour un Hamiltonien comportant une masse constante. Tout calcul analytique exact, doit se réduire à notre résultat si on fait un développement en série de puissances en $\hbar$. Dans ce paragraphe, nous allons retrouver notre résultat *semi-classique* représenté dans l'équation (4.22) en partant d'un calcul exact du propagateur de *Bloch* d'un oscillateur harmonique. Il est facile de vérifier que notre développement *semi-classique* n'est qu'une limite si nous faisons un développement de *Taylor* du calcul exact en série de puissances de $\hbar$. Par exemple pour un hamiltonien d'un potentiel d'oscillateur harmonique à d dimensions

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \vec{r}^2 \quad (4.24)$$

Où $\vec{r}^2 = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_d^2$. Le propagateur de *Bloch* correspondant à l'hamiltonien ci-dessus est donné par [55]

$$C_{OH}^{exact}(\vec{r}, \vec{r}'; \gamma) = \left(\frac{m\omega_0}{2\pi\hbar \sinh \gamma\hbar\omega_0} \right)^{\frac{d}{2}} \times \exp \left\{ -\frac{m\omega_0}{\hbar} \tanh \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right) \left(\frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2} \right)^2 \right\} \\ \times \exp \left\{ -\frac{m\omega_0}{\hbar} \coth \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right) \left(\frac{\vec{r} - \vec{r}'}{2} \right)^2 \right\} \quad (4.25)$$

Mais en fait, nous sommes intéressés par un système unidimensionnel. On peut réécrire la matrice densité de *Bloch* correspondant à l'hamiltonien d'un système de particules indépendants piégées dans un potentiel d'oscillateur harmonique à 1d, $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ comme suivant

$$C_{OH}^{exact}(X, s; \gamma) = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh \gamma\hbar\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \times \exp \left\{ -\frac{m\omega}{\hbar} X^2 \tanh \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right) \right\} \\ \times \exp \left\{ -\frac{m\omega}{4\hbar} s^2 \coth \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right) \right\} \quad (4.26)$$

Pour avoir un développement en série de puissances en $\hbar$, et rester consistant à l'ordre $\hbar^2$ on va développer en série de *Taylor* les fonctions hyperboliques $\tanh \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right)$, $\sinh(\gamma\hbar\omega)$ et $\coth \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right)$ et ne garder que les termes jusqu'à l'ordre deux en puissances $\hbar$. Nous pouvons écrire

$$\tanh \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right) = \frac{\gamma\hbar\omega}{2} - \frac{(\gamma\hbar\omega)^3}{24} + \dots \quad (4.27)$$

$$\sinh(\gamma\hbar\omega) = \gamma\hbar\omega + \frac{(\gamma\hbar\omega)^3}{6} + \dots \quad (4.28)$$

$$\coth \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right) = \frac{2}{\gamma\hbar\omega} + \frac{\gamma\hbar\omega}{6} + \dots \quad (4.29)$$

Utilisant ce développement de *Taylor* et employant l'identité suivante $(1 + \varepsilon)^n = 1 + n\varepsilon$, on montre qu'en ne retenant que les termes d'ordre $\hbar^2$, on obtient

$$\left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(\gamma\hbar\omega)} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{m}{2\pi\gamma\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{\hbar^2}{12m} \gamma^2 \frac{d^2V}{dX^2} \right) \quad (4.30)$$

Le développement de *Taylor* des fonctions $\tanh \left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right)$ et $\coth \left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right)$ nous permet d'écrire

$$-\frac{m\omega}{\hbar} \tanh \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right) X^2 = -\gamma V(X) + \frac{\hbar^2}{24m} \gamma^3 \left(\frac{dV}{dX} \right)^2 \quad (4.31)$$

$$-\frac{m\omega}{4\hbar} \coth \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right) s^2 = -\frac{m}{2\hbar^2\gamma} s^2 - \frac{\gamma}{24} \left(\frac{d^2V}{dX^2} \right) s^2 \quad (4.32)$$

où $\frac{dV}{dX} = m\omega^2 x$ et $\frac{d^2V}{dX^2} = m\omega^2$. Remplaçons les équations (4.31) et (4.32) dans l'équation (4.26), on montre que

$$\begin{aligned} & \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} \tanh\left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2}\right) X^2\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{4\hbar} \coth\left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2}\right) s^2\right) \\ &= \exp(-\gamma V(X)) \exp\left(-\frac{ms^2}{2\gamma\hbar^2}\right) \times \left(1 + \frac{\hbar^2}{24m} \gamma^3 \left(\frac{dV}{dX}\right)^2 - \frac{\gamma}{24} \left(\frac{d^2V}{dX^2}\right) s^2\right) \end{aligned}$$

Finalement, et après insertion dans l'équation (4.26), on retrouve bien notre résultat *semi-classique* voulu

$$\begin{aligned} C_{OH}^{sc}(x, x'; \gamma) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\gamma\hbar^2}} \exp(-\gamma V(X)) \exp\left(-\frac{ms^2}{2\gamma\hbar^2}\right) \\ &\times \left\{ 1 + \frac{\hbar^2}{24m} \left[\left(\frac{d^2V}{dX^2}\right) \gamma^2 \left(-2 - \frac{ms^2}{\gamma\hbar^2}\right) + \left(\frac{dV}{dX}\right)^2 \gamma^3 \right] \right\} \quad (4.33) \end{aligned}$$

En conclut que le calcul exact du propagateur de *Bloch* $C_{OH}^{exact}(x, x'; \gamma)$ se réduit à notre résultat *semi-classique* $C_{OH}^{sc}(x, x'; \gamma)$ si on fait un développement en série de puissances en $\hbar$. Ce résultat est une bonne manière de s'assurer que nous avons établi la bonne expression analytique du propagateur *semi-classique* $C^{sc}(x, x'; \gamma)$. Nous donnerons dans le paragraphe suivant le calcul exact du propagateur pour un simple cas d'un potentiel d'oscillateur harmonique que nous avons considéré dans ce chapitre.

4.5 Calcul exact du propagateur de Bloch

D'après la définition (4.2), il apparait qu'un calcul exact du propagateur de *Bloch*, nécessite la connaissance de la forme explicite des fonctions $\varphi_j(x)$ et les valeurs ε_j , mais ce n'était pas indispensable dans la plupart des systèmes physiques étudiés par cet outil. En effet, pour des formes de potentiels spécifiques, qui sont d'un grand intérêt physique, des expressions analytiques exactes pour le propagateur de *Bloch* ont été obtenues sans avoir besoin de faire recours à la résolution de l'équation de *Schrödinger* pour obtenir les fonctions d'ondes de ces systèmes. Le but de ce paragraphe est de discuter en détail le calcul exact du propagateur de *Bloch* pour un système de particules libres, et un autre confiné dans un potentiel d'oscillateur harmonique. Ce résultat est bien celui obtenu dans la référence [55]

4.5.1 Cas d'une particule libre $V(x) = 0$

Dans la base d'une onde plane, c'est-à-dire une particule libre qui correspond à une énergie potentielle uniformément nulle $V(x) = 0$, on considère un système de particules de masse m dans un espace de dimension $d = 1$. L'équation (4.2) correspondante se réduit donc à

$$C(x, x'; \gamma) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp \left(ik(x - x') - \gamma \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \quad (4.34)$$

L'expression du propagateur de *Bloch* pour une particule libre peut se mettre dans ce cas sous la forme suivante

$$C(x, x'; \gamma) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\gamma} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{m}{2\hbar^2\gamma} (x - x')^2 \right] \quad (4.35)$$

4.5.2 Cas d'une particule piégée dans un potentiel d'oscillateur harmonique

On rappelle maintenant le cas d'une particule piégée dans un potentiel d'oscillateur harmonique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Nous allons établir l'expression analytique exacte pour la matrice densité de *Bloch*, on considérant un système de fermions indépendants, décrit par l'équation de *Schrödinger* indépendante du temps [55].

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \Psi_j(x) = \varepsilon_j \Psi_j(x)$$

Pour établir une expression exacte de la matrice densité de *Bloch*, nous partons de la relation (4.3) que l'on réécrit comme

$$\frac{\partial C}{\partial \gamma} + \frac{1}{2}(HC + CH) = 0 \quad (4.36)$$

Ensuite, pour obtenir l'équation de *Bloch*, il est préférable de travailler dans l'espace des phases. On introduit la transformée de *Wigner* [9] pour transformer l'équation (4.36) dans l'espace des phases, nous commençons par la propriété qui donne la transformée de *Wigner* d'un produit de deux opérateurs A et B

$$(AB)_w = A_w \exp \left(\frac{i\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} \right) B_w$$

Où $A_w(x, p)$ et $B_w(x, p)$ sont respectivement les transformés de *Wigner* des opérateurs A, B et $\overleftrightarrow{\Lambda}$ est l'opérateur à une dimension qui agit à gauche et à droite comme l'indiquent les flèches

$\overleftrightarrow{\Lambda} = \left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial x} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial x} \right)$. Si on applique la transformation de *Wigner* à l'équation de *Bloch* (4.36) et en sachant que la transformée de *Wigner* $H_w(x, p)$ est facilement calculée et coïncide avec l'hamiltonien classique $H_w(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, on a la transformée de *Wigner* de l'équation de *Bloch*

$$\frac{\partial C_w(x, p; \gamma)}{\partial \gamma} + \frac{1}{2} \left[H_w \exp\left(\frac{i\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda}\right) C_w(x, p; \gamma) + C_w(x, p; \gamma) \exp\left(\frac{i\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda}\right) H_w \right] = 0 \quad (4.37)$$

Où $C_w(x, p; \gamma)$ est la transformée de *Wigner* de la matrice densité de *Bloch* $C(x, x'; \gamma)$. Maintenant si on considère que les N fermions sont piégés dans un potentiel d'oscillateur harmonique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ et en utilisant le développement en séries de *Taylor* de $\exp\left(\frac{i\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda}\right)$ nous trouvons que tout les termes en puissances impaires en $\hbar$ sont nuls [55]. L'équation (4.37) devient donc

$$\frac{\partial C_w(x, p; \gamma)}{\partial \gamma} + H_w(x, p) \left[\cos\left(\frac{\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda}\right) \right] C_w(x, p; \gamma) = 0 \quad (4.38)$$

Ensuite, nous faisons un développement en série de *Taylor* pour l'opérateur $\cos\left(\frac{\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda}\right)$ et en ne gardant que les termes jusqu'à l'ordre deux en puissance de $\hbar$, tous les termes d'ordre supérieur ($\hbar^4, \hbar^6, \dots$) vont disparaître cela est dû au fait que l'hamiltonien classique, $H_w(x, p)$ est d'ordre deux en position et en moment. Ce qui réduit l'équation (4.38) à :

$$\frac{\partial C_w(X, p; \gamma)}{\partial \gamma} + H_w(X, p) C_w(X, p; \gamma) - \frac{\hbar^2}{8} H_w(X, p) \overleftrightarrow{\Lambda}^2 C_w(X, p; \gamma) = 0 \quad (4.39)$$

Pour déterminer la transformée de *Wigner* $C_w^{Ho}(X, p; \gamma)$, on doit résoudre l'équation (4.39). Cette équation est utilisée pour examiner la structure du propagateur de *Bloch* dans l'espace des phases pour un système de particules dans un potentiel d'oscillateur harmonique, pour un système de particules dans un potentiel linéaire et même pour un système de particules soumis à un champs magnétique. On substitue l'expression de la transformée de *Wigner* de l'hamiltonien d'oscillateur harmonique $H_w(X, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$ dans (4.39) on obtient

$$\frac{\partial C_w^{Ho}}{\partial \gamma} + \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \right) C_w^{Ho} - \frac{\hbar^2}{8} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \right) \overleftrightarrow{\Lambda}^2 C_w^{Ho} = 0 \quad (4.40)$$

Pour l'hamiltonien d'un potentiel d'oscillateur harmonique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, la solution de (4.40) a été obtenue par les auteurs de la références [55]. Ils ont choisi un ansatz, sous la forme suivante

$$C_w^{Ho}(X, p, \gamma) = f(\gamma) \exp \left[-g(\gamma) \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \right) \right] \quad (4.41)$$

En remplaçant par l'ansatz ci-dessus, dans l'équation (4.40), nous obtenons

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \right) \left(1 - \frac{dg}{d\gamma} - \frac{(\hbar\omega)^2}{4} g^2 \right) + \left(\frac{1}{f} \frac{df}{d\gamma} + \frac{(\hbar\omega)^2}{4} g \right) = 0 \quad (4.42)$$

Dans ce cas les fonctions $f(\gamma)$ et $g(\gamma)$ solutions de l'équation (4.42) sont données par

$$g(\gamma) = \frac{2}{\hbar\omega} \tanh\left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2}\right) \quad (4.43)$$

$$f(\gamma) = \frac{1}{\cosh\left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2}\right)} \quad (4.44)$$

Enfin, en remplaçant les fonctions $g(\gamma)$ et $f(\gamma)$ dans l'équation (4.41), on obtient une solution exacte de la matrice densité de *Bloch*, pour un hamiltonien d'oscillateur harmonique, obtenue dans l'espace des phases, c'est-à-dire la transformée de *Wigner* $C_w^{Ho}(X, p)$

$$C_w^{Ho}(X, p) = \frac{1}{\cosh\left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2}\right)} \exp \left[-\frac{2}{\hbar\omega} \tanh\left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2}\right) \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \right) \right] \quad (4.45)$$

Pour revenir à la matrice densité de *Bloch* $C_{OH}^{exact}(x, x'; \gamma)$ dans l'espace réel, on applique la transformation de *Wigner*. On déduit alors l'expression finale du propagateur de *Bloch* qui est donnée coordonnées de l'espace .

$$\begin{aligned} C_{OH}^{exact}(x, x'; \gamma) &= \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh \gamma\hbar\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \times \exp \left\{ -\frac{m\omega}{\hbar} \left[\left(\frac{x+x'}{2} \right)^2 \right] \tanh \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right) \right\} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{m\omega}{4\hbar} (x-x')^2 \coth \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.46)$$

Il sera plus commode d'utiliser les coordonnées du centre de masse X et relative s pour avoir :

$$\begin{aligned} C_{OH}^{exact}(X, s; \gamma) &= \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh \gamma\hbar\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \times \exp \left\{ -\frac{m\omega}{\hbar} X^2 \tanh \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right) \right\} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{m\omega}{4\hbar} s^2 \coth \left(\frac{\gamma\hbar\omega}{2} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.47)$$

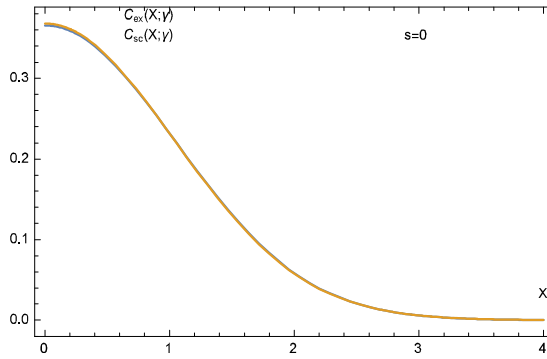
On remarque que si la vitesse angulaire ω est nulle, l'équation ci-dessus se réduit à celle donnée par (4.35) et on retrouve le propagateur d'une particule libre. On note aussi que ce résultat est obtenu par les auteurs de la référence [55].

4.6 Résultats numériques du propagateur

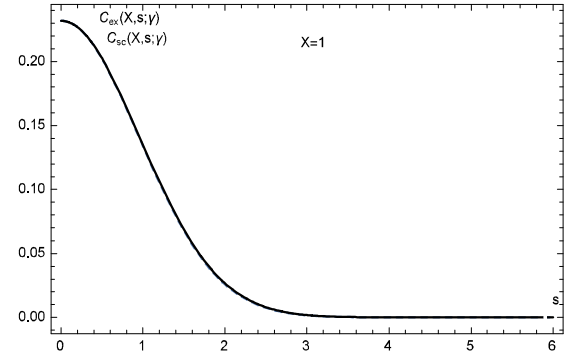
Notre but dans cette partie est de comparer le propagateur de *Bloch* exact avec le propagateur *semi-classique* pour un système de N fermions confinés dans un potentiel d'oscillateur harmonique pour une masse constante.

Sur la figure 4.1, on s'est limité à un calcul pour $s = 0$, et ceci dans le but de retrouver avec les résultats obtenus dans la référence [58], qui considère un cas particulier de notre résultats où on retrouve le "slater sum".

Sur la figure 4.2, Les profiles sont semblables entre le calcul *semi-classique* donné par l'équation (4.22) pour une masse constante $f = 1$ et le calcul exact donné par l'équation (4.47). Donc la comparaison numérique entre nos résultats *semi-classique* avec du calcul exact montre une très bonne concordance entre les deux méthodes de calcul. Ce résultat souligne l'importance du calcul *semi-classique*.



Comparaison entre la partie diagonale du propagateur de Bloch semi classique "slater sum" pour une masse constante $f = 1$ avec le propagateur exact donné par l'équation (4.47) pour $s = 0$



Comparaison entre le propagateur de Bloch semi-classique donné par l'équation (4.22) pour une masse constante $f = 1$ et le propagateur exact donné par l'équation (4.47) pour $X = 1$

Chapitre 5

Méthodes semi-classiques appliquées au noyau atomique

5.1 Introduction

L'étude des noyaux avec le terme tenseur dans l'interaction effective à deux corps a commencé dans les années 90 et a continué à se développer. Durant ces dernières années, il y a eu beaucoup de travaux théoriques sur l'effet du terme tenseur dans l'interaction nucléon-nucléon. Cette partie de la force nucléon-nucléon a été généralement négligée dans le calcul de type champ moyen. Très récemment, ce terme tenseur a été inclus dans le modèle de *Skyrme-Hartree-Fock* [77] avec un terme tenseur dans l'interaction.

On peut réaliser le calcul self-consistent des quantités moyennes, sans utiliser des fonctions d'ondes, mais en employant justement des méthodes *semi-classiques* et en particulier le modèle *Thomas-Fermi* généralisé (*ETF*) qui sera l'objet de notre dernier chapitre, méthodes qui sont beaucoup plus rapides que les calculs *HF*. L'intérêt majeur de cette technique est que dans certains cas bien précis, contrairement aux calculs *HF*, les équations associées à la minimisation de l'énergie sont solubles. Par conséquent, nous avons à notre disposition de nouvelles expressions analytiques. L'objet des études *semi-classiques* est donc de calculer des densités, énergies et potentiels moyens self-consistents à partir d'une force effective déterminée par des calculs *HF* sur des noyaux sphériques, ou déformés.

Evidemment, les calculs *semi-classiques* peuvent aider à redéterminer les paramètres de la

force, en particulier en ce qui concerne les barrières de fission [74]. Une telle stratégie a été utilisée par *Bartel* et al [74] pour détermination de paramétrisation de SKM^* , première force de *Skyrme* donnant à la fois des barrières de fissions d'actinides réalistes.

Nous allons nous intéresser ici à l'interaction phénoménologique de *Skyrme*, dont la propriété principale est la dépendance de la densité ρ . Ce type d'interaction a été proposé pendant longtemps, puis largement utilisé pour la description des noyaux sphériques puis déformés. Il est proposé par *Voutherin* et *Brink* [70] qui pourrait reproduire l'énergie de liaison nucléaire sur l'ensemble du tableau périodique ainsi que les rayons nucléaires avec forme analytique très simple, leur utilisation est simple et leur pouvoir prédictif important [65], de quoi justifier l'importance de cette force qui consiste à paramétrer la force effective.

Dans ce contexte nous allons présenter les hypothèses, les approximations, et les ingrédients qui entrent dans la construction d'une telle approche. On se propose d'étudier l'effet du terme tenseur sur les propriétés du noyau en symétrie axiale, dans le cadre de l'approche de *Hartree-Fock* combinée avec la méthode *semi-classique* de *Thomas-Fermi* étendue pour calculer les courants de spin engendrés par le terme tenseur.

5.2 Modèle *Thomas-Fermi* généralisé

5.2.1 Développement Wigner-Kirkwood

A l'aide du développement *semi-classique* dérivé par *Wigner* et *Kirkwood* appliqué à la densité de *Bloch*, on peut construire les expressions de densités $\tau_{ETF}(\rho)$ et $J_{ETF}(\rho)$ comme des fonctions de la densité dans le modèle de *Thomas-Fermi* généralisé (ETF). La transformation de *Wigner-Kirkwood* s'exprime comme un développement de la densité de *Bloch* autour de sa valeur obtenue dans le cadre de l'approximation de *Thomas-Fermi* (TF)

$$C(\vec{r}, \vec{r}') = C_{TF}(\vec{r}, \vec{r}')\Phi(\vec{r}, \vec{r}') \quad (5.1)$$

$$C_{TF}(\vec{r}, \vec{r}') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\gamma}\right)^{\frac{3}{2}} \exp(-\gamma V(R)) \exp\left(-\frac{m}{2\hbar^2\gamma}r^2\right) \quad (5.2)$$

Où $\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}, \vec{r}')$ correspond aux coordonnées du centre de masse et $\vec{r} = (\vec{r} - \vec{r}')$ les coordonnées relatives. La fonction à déterminer $\Phi(\vec{r}, \vec{r}')$ est développée en puissance de $\hbar$

$$\Phi(\vec{r}, \vec{r}') = 1 + \sum_{m \geq 0} \hbar^m \chi_m(\vec{r}, \vec{r}') \quad (5.3)$$

Pour un potentiel local de type *Skyrme*, les fonctions χ_m contiennent les dérivées d'ordre n du potentiel $V(\vec{r})$. Notons seulement que l'énergie du système pour une force de *Skyrme* ne s'exprime qu'en fonction des densités locales. On applique la transformée de laplace inverse, équation (4.8), terme par terme sur la série en $\hbar$ pour obtenir des développements des densités locales de la fonctionnelle en gradients du potentiel central de *Skyrme* $V_q(\vec{r})$ et de la masse effective $m_q^*(\vec{r})$ ainsi que du potentiel spin-orbite $\vec{W}_q(\vec{r})$. Les expressions *semi-classiques* de la densité locale, la densité d'énergie cinétique et le courant de probabilité de spin sont données par

$$\rho_{ETF} = \rho_{TF}(\vec{r}) + \rho_2(\vec{r}) + \rho_4(\vec{r}) + \dots, \quad (5.4)$$

$$\tau_{ETF}(\rho) = \tau_{TF}(\rho) + \tau_2(\rho) + \tau_4(\rho) + \dots, \quad (5.5)$$

$$\vec{J}_{ETF}(\rho) = \vec{J}_2(\rho) + \vec{J}_4(\rho) + \dots, \quad (5.6)$$

L'expression *semi-classique* de la densité locale à l'ordre $\hbar^2$ est obtenue par *Grammaticos* et *Voros* et donnée

$$\begin{aligned} \rho_{ETF}(\vec{r}) = & \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (\lambda - V)^{3/2} \theta(\lambda - V) \left[1 - \frac{\hbar^2}{16m} (\vec{\nabla}^2 V (\lambda - V)^{-2}) + \right. \\ & \left. \frac{1}{4} (\vec{\nabla} V)^2 (\lambda - V)^{-3} \right] \end{aligned} \quad (5.7)$$

A l'ordre $\hbar^2$, on obtient les fonctionnelles suivantes

$$\begin{aligned} \tau_{ETF}(\rho_q) = & \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} \rho_q^{5/3} + \frac{1}{36} \frac{(\vec{\nabla} \rho_q)^2}{\rho_q} + \frac{1}{3} \Delta \rho_q \\ & + \frac{1}{6f} \left[\vec{\nabla} \rho_q \cdot \vec{\nabla} f_q + \rho_q \Delta f_q - \frac{1}{2} \rho \frac{(\vec{\nabla} f_q)^2}{f_q} \right] + \frac{1}{2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right) \rho_q \left(\frac{\vec{W}_q}{f_q} \right)^2 \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$\vec{J}_2(\rho) = - \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \frac{\rho}{f} \vec{W} \quad (5.9)$$

Où l'indice q est relatif à chaque état de charge neutron ou proton. Pour l'ordre 4 en $\hbar$ les calculs *semi-classiques* deviennent fastidieux. Les expressions complètes des fonctionnelles sont données par *Grammaticos* et *Voros*.

5.3 Fonctionnelle de la densité d'énergie de Skyrme avec terme de la force tenseur

On rappelle que l'énergie de liaison dans l'approximation *Hartree-Fock* en utilisant une interaction de *Skyrme* à deux corps, s'exprime comme une fonctionnelle des densités de particules $\rho(\vec{r})$, des densités d'énergie cinétique $\tau(\vec{r})$ et des densités de spin-orbite $J(\vec{r})$. On sait que l'énergie totale du noyau pour une interaction de *Skyrme* s'écrit comme

$$E_{HF} = \int d^3r \xi_{Sk}(\rho, \tau, J) \quad (5.10)$$

La minimisation de l'énergie par rapport aux variations de la fonction d'onde à une particule $\varphi_i(\vec{r})$ conduit aux équations de *HF*. Si on arrive à exprimer les densités exactement en fonction de la densité locale $\rho(\vec{r})$, l'énergie E_{HF} devient par conséquent fonctionnelle uniquement de $\rho(\vec{r})$. L'obtention des fonctions d'ondes individuelles $\varphi_i(\vec{r})$ devient donc inutile. En substituant dans la fonctionnelle de *Skyrme* les densités usuelles par leur versions *semi-classique*, la densité d'énergie s'écrira

$$\xi_{Sk}(\rho, \tau, J) \longrightarrow \xi_{Sk}(\rho_{ETF}, \tau_{ETF}, J_{ETF}) \quad (5.11)$$

et l'énergie E_{ETF} du système étudié (noyau ou matière nucléaire)

$$E_{ETF}[\rho_{ETF}, \tau_{ETF}, J_{ETF}] = \int d^3r \xi_{ETF} = \int d^3r \xi_{cin}(\tau_{ETF}) + \xi_{Sk}(\rho_{ETF}, \tau_{ETF}, J_{ETF}) \quad (5.12)$$

avec ξ_{cin} la densité d'énergie cinétique. On recherche le minimum d'énergie du système en appliquant un principe variationnel sur la densité d'énergie ξ_{ETF} . Le calcul *HF* est remplacé par un calcul variationnel de la forme

$$\frac{\delta}{\delta \rho} \left[E_{ETF} - \lambda \int d^3r \rho(\vec{r}) \right] = 0 \quad (5.13)$$

Où λ est un multiplicateur de *Lagrange* assurant que la densité est normalisée au nombre total N de particules

$$\int d^3r \rho(\vec{r}) = N \quad (5.14)$$

Dans le cas d'un système avec $N \neq Z$, on a deux mutiplicateurs de *Lagrange*, un pour chaque espèce de nucléons.

5.4 Interaction de *Skyrme* et Energie du noyau

5.4.1 Interaction de *Skyrme*

L'interaction phénoménologique nucléon-nucléon de *Skyrme* fut proposée en 1956 [72]. Elle a ensuite été utilisée avec succès pour la description de noyaux sphériques puis déformés. La principale propriété de l'interaction effective phénoménologique est qu'elle dépend de la densité et les paramètres sont ajustés de telle sorte qu'elle à reproduise les propriétés des noyaux. Elle a pu être appliquée à tous les noyaux, y compris les plus lourds, et permet de reproduire et interpréter un nombre considérable de résultats expérimentaux. Etant phénoménologique, l'interaction de *Skyrme* n'est adaptée qu'à l'étude des systèmes dont la densité est proche de la densité nucléaire et possédant des propriétés d'invariance (invariance par renversement du temps). On suppose que le sous espace des états à une particule est invariant par renversement du temps. Sous sa forme standards la plus utilisée, l'interaction effective de *Skyrme* s'écrit

$$v_{Sky}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = v_c(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + v_{so}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + v_t(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (5.15)$$

où v_c représente le potentiel central

$$\begin{aligned} v_c(\vec{R}, \vec{s}) = & t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{s}) + \frac{t_1}{2} (1 + x_1 P_\sigma) \\ & \times \left[\vec{k}'^2 \delta(\vec{s}) + \delta(\vec{s}) \vec{k}^2 \right] + t_2 (1 + x_2 P_\sigma) \vec{k}' \cdot \delta(\vec{s}) \vec{k} \\ & + \frac{t_3}{6} (1 + x_3 P_\sigma) \rho_0^\alpha(\vec{R}) \delta(\vec{s}), \end{aligned} \quad (5.16)$$

v_{so} est l'interaction spin-orbit

$$v_{so}(\vec{s}) = iW_0 (\sigma_1 + \sigma_1) \vec{k}' \cdot \delta(\vec{s}) \vec{k} \quad (5.17)$$

et v_t représente l'interaction tenseur

$$\begin{aligned} v_t(\vec{s}) = & \frac{T_E}{2} \left\{ \left[3(\sigma_1 \cdot \vec{k}')(\sigma_2 \cdot \vec{k}') (\sigma_1 \cdot \sigma_2) \vec{k}'^2 \right] \delta(\vec{s}) \right. \\ & + \delta(\vec{s}) \left[3(\sigma_1 \cdot \vec{k})(\sigma_2 \cdot \vec{k}) - (\sigma_1 \cdot \sigma_2) \vec{k}^2 \right] \left. \right\} \\ & + T_0 \left[3(\sigma_1 \cdot \vec{k}') \delta(\vec{s}) (\sigma_2 \cdot \vec{k}) - (\sigma_1 \cdot \sigma_2) \vec{k}' \cdot \delta(\vec{s}) \vec{k} \right]. \end{aligned} \quad (5.18)$$

avec les notations usuelles

$$\vec{s} = (\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \quad \vec{R} = \frac{(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)}{2}, \quad \vec{\sigma} = \vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2$$

Où $\vec{k}$ et $\vec{k}'$ sont les opérateurs de moment relatif définis tel que

$$\vec{k} = \frac{1}{2i}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2), \quad \vec{k}' = -\frac{1}{2i}(\vec{\nabla}'_1 - \vec{\nabla}'_2)$$

et où P_σ l'opérateur d'échange de spin,

$$P_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$$

Les valeurs des paramètres de la force $t_0, t_1, t_2, t_3, T_0, T_E, x_0, x_1, x_2, x_3, \alpha$ et W_0 ont été ajustées depuis les premières paramétrisations classiques (SI et SII) de *Vautherin et Brink* [70], et (SIII-SVI) de *Beiner et al* [71] pour reproduire les propriétés des états fondamentaux des noyaux (énergie et rayon). L'interaction SIII est l'une des toutes premières à avoir réussi à reproduire correctement les propriétés statiques des noyaux à travers toute la table périodique. *Krivine et al* [73] ont introduit SKM, pour l'étude des résonances électriques dipolaires et monopolaire. Elle a été modifiée (SKM*) par *Bartel et al* [74], pour reproduire les barrières de fission dans le ^{240}Pu . *Tondeur et al* [75] ont développé une interaction RATP, en ajoutant deux paramètres qui dépendent de J^2 et J_q^2 . *Chabanat et al* [76] ont pu décrire avec Sly4 les propriétés spectroscopiques des noyaux loin de la vallée de stabilité. *Lesinski* [77] et al ont paramétrisé l'interaction de *Skyrme* en ajoutant un terme tenseur qui dépend de $J_{\mu\nu}$, qui sera définis plus loin (section 5.4). Les termes ont été ajustés sur les propriétés des noyaux sphériques et déformés pour les noyaux magique et semi-magique.

5.4.2 Fonctionnelle de la densité d'énergie de *Skyrme*

Pour les systèmes invariants par renversement du temps, la fonctionnelle de la densité d'énergie de *Skyrme* est écrite en fonction des densités isoscalaire $\rho_0 = \rho_n + \rho_p$ et isovecteur $\rho_1 = \rho_n - \rho_p$. La fonctionnelle ξ_{Sky} associée a cette intraction effective de *Skyrme* est donnée par les auteurs de la référence [77] par

$$\begin{aligned} \xi_{Sky}(\vec{r}) = & \frac{\hbar^2}{2m} \tau_0 + \sum_{t=0,1} \left\{ C_t^\rho [\rho_0] \rho_t^2 + C_t^{\Delta\rho} [\vec{\nabla} \rho_t^2] + C_t^\tau \rho_t \tau_t \right. \\ & - C_t^T \sum_{\mu\nu} J_{t\mu\nu} J_{t\mu\nu} - \frac{1}{2} C_t^F \left[\left(\sum_{\mu} J_{t\mu\nu} \right)^2 + \sum_{\mu\nu} J_{t\mu\nu} J_{t\mu\nu} \right] \\ & \left. + C_t^{\nabla J} \rho_t \vec{\nabla} \cdot J_{t\mu\nu} \right\}, \end{aligned} \quad (5.19)$$

Il faut noter que les composantes locales impaires de la matrice de densité disparaissent pour les systèmes invariants par renversement du sens du temps [77], donc la fonctionnelle de la densité d'énergie de *Skyrme* n'est donnée qu'en fonction des densités isoscalaire $\rho_0 = \rho_n + \rho_p$ et isovecteur $\rho_1 = \rho_n - \rho_p$ qui correspondent pour l'indice $t = 0$ et $t = 1$. En effet l'énergie totale du noyau peut s'exprimer en une intégrale de la fonctionnelle totale

$$\begin{aligned} E &= \int \xi_{tot} d^3r \\ &= \int (\xi_{Sky}(\vec{r}) + \xi_{Coul}(\vec{r})) d^3r \end{aligned} \quad (5.20)$$

la densité d'énergie potentielle de *Coulomb* $\xi_{Coul}(\vec{r})$ s'écrit, comme la somme de deux contributions, le terme direct dit terme de *Hartree* et d'un terme d'échange ; ce dernier est calculé à l'approximation de *Slater* [31], soit

$$\xi_{Coul}(\vec{r}) = \frac{e^2}{2} \rho_p(\vec{r}) \int \frac{\rho_p(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r' - \frac{3}{4} e^2 \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \rho_p^{\frac{4}{3}}(\vec{r}) \quad (5.21)$$

Notons que la fonctionnelle d'énergie $\xi_{tot}(\vec{r})$ est une fonction d'un certain nombre de densités locales qui s'expriment en fonction des états occupés à une particule. Elles sont données respectivement par

- la densité de nucléons

$$\rho_q(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma} |\varphi(\vec{r}, \sigma, q)|^2, \quad (5.22)$$

- la densité d'énergie cinétique

$$\tau_q(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma} \left| \vec{\nabla} \varphi_i(\vec{r}, \sigma, q) \right|^2 \quad (5.23)$$

- la densité spin-orbite

$$\vec{J}_q(\vec{r}) = (-i) \sum_{i,\sigma\sigma'} \varphi_i^*(\vec{r}, \sigma, q) \left[\vec{\nabla} \varphi_i(\vec{r}, \sigma, q) \times \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma' \rangle \right] \quad (5.24)$$

où l'indice q représente les différents états de charge (les neutrons (n) et les protons (p)), les sommations i (espace) et σ, σ' (spin) portent sur tous les états occupés d'une particule, et les densités totales sont $\rho = \rho_n + \rho_p$, $\tau = \tau_n + \tau_p$, $\vec{J} = \vec{J}_n + \vec{J}_p$

Dans ce qui suit, nous voudrions étudier, en particulier, la contribution de l'interaction tenseur. Revenons maintenant à la contribution de la densité tenseur spin-courant $J_{\mu\nu}(\vec{r})$.

Cette quantité est définie par

$$J_{\mu\nu}(\vec{r}) = -\frac{i}{2} (\nabla_\mu - \nabla'_\mu) \sum_{\sigma, \sigma'} \rho(\vec{r} \cdot \sigma, \vec{r}' \cdot \sigma')|_{\vec{r}=\vec{r}'} \langle \sigma' | \sigma_\nu | \sigma \rangle \quad (5.25)$$

où $\rho(\vec{r} \cdot \sigma, \vec{r}' \cdot \sigma')$ est la matrice densité des protons et neutrons dans l'espace des coordonnées. Suivant les propriétés de transformation par rotation, la densité tenseur spin-courant $J_{\mu\nu}(\vec{r})$ est séparée en trois composants, pseudoscalaire $J^{(0)}(\vec{r})$, vecteur antisymétrique $J_\lambda^{(1)}(\vec{r})$ et une contribution pseudotenseur symétrique

$$J_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{1}{3} \delta_{\mu\nu} J^{(0)}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \sum_\lambda \epsilon_{\mu\nu\lambda} J_\lambda^{(1)}(\vec{r}) + J_{\mu\nu}^{(2)}(\vec{r}) \quad (5.26)$$

où $\delta_{\mu\nu}$ et $\epsilon_{\mu\nu\lambda}$ sont le symbole *Kronecker* et le tenseur de *Levi-Civita* respectivement.

Avec

$$J^{(0)}(\vec{r}) = \sum_{\mu=x}^z J_{\mu\mu}(\vec{r}), \quad (5.27)$$

$$J_\lambda^{(1)}(\vec{r}) = \sum_{\mu, \nu=x}^z \epsilon_{\mu\nu\lambda} J_{\mu\nu}(\vec{r}), \quad (5.28)$$

$$J_{\mu\nu}^{(2)}(\vec{r}) = \frac{1}{2} [J_{\mu\nu}(\vec{r}) + J_{\nu\mu}(\vec{r})] - \frac{1}{3} \delta_{\mu\nu} \sum_\lambda J_{\lambda\lambda}(\vec{r}). \quad (5.29)$$

Ceci entraîne les conditions suivantes, dans les coordonnées cartésiennes

$$\sum_{\mu, \nu=x}^z J_{\mu\nu}(\vec{r}) J_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{1}{3} [J^{(0)}(\vec{r})]^2 + \frac{1}{2} \vec{J}(\vec{r})^2 + [J^{(2)}(\vec{r})]^2 \quad (5.30)$$

et

$$\frac{1}{2} \left[\left(\sum_{\mu=x}^z J_{\mu\mu} \right)^2 + \sum_{\mu, \nu=x}^z J_{\mu\nu} J_{\nu\mu} \right] = \frac{2}{3} [J^{(0)}]^2 - \frac{1}{4} \vec{J}^2 + \frac{1}{2} [J^{(2)}(\vec{r})]^2 \quad (5.31)$$

où les μ et ν indiquent les composantes de coordonnées cartésiennes $\{x, y, z\}$.

Où $\vec{J}$ représente la densité spin-orbite bien connue avec les composantes cartésiennes $J_\lambda^{(1)}$ données par l'équation (5.28). En effet, à partir de (5.31) et (5.19), la fonctionnelle de la densité d'énergie de *Skyrme* [78] prend la forme suivante

$$\begin{aligned} \xi_{Sky} = & \frac{\hbar^2}{2m} \tau_0 + \sum_{t=0,1} \left\{ C_t^\rho [\rho_0] \rho_t^2 - C_t^{\Delta\rho} \left(\vec{\nabla} \rho_t^2 \right) + C_t^\tau \rho_t \tau_t \right. \\ & + \frac{1}{3} C_t^{J_0} [J_t^{(0)}]^2 + \frac{1}{2} C_t^{J_1} \vec{J}_t^2 + C_t^{J_2} [J_t^{(2)}(\vec{r})]^2 \\ & \left. + C_t^{\nabla J} \rho_t \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_t \right\}, \end{aligned} \quad (5.32)$$

Où les paramètres $C_t^{J_0}$, $C_t^{J_2}$, $C_t^{J_1}$ sont défini en fonction des paramètres C_t^F et C_t^T

$$C_t^{J_0} = -(2C_t^F + C_t^T), \quad C_t^{J_2} = -\left(\frac{1}{2}C_t^F + C_t^T\right), \quad C_t^{J_1} = -\left(\frac{1}{2}C_t^F + C_t^T\right) \quad (5.33)$$

Pour déduire le hamiltonien à un corps pour les nucléons de type $q = [n, p]$, on minimise l'énergie avec la contrainte de normalisation. La minimisation de l'énergie avec la contrainte de normalisation conduit à un problème aux valeurs propres d'un opérateur à un corps.

$$\frac{\delta}{\delta\varphi_j^*(\vec{r}, \sigma, q)} \times \int d^3r \left[\xi_{Sky}(\vec{r}) - \sum_q \sum_{j=1}^{N_q} \sum_{\sigma'} \varepsilon_j^{(q)} |\varphi_j(\vec{r}, \sigma', q)|^2 \right] = 0 \quad (5.34)$$

qui peut se mettre sous cette forme

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi_{Sky}}{\partial \varphi_j^*(\vec{r}, \sigma, q)} - \vec{\nabla} \left[\frac{\partial \xi_{Sky}}{\partial \vec{\nabla} \varphi_j^*(\vec{r}, \sigma, q)} \right] &= h_q \varphi_j(\vec{r}, \sigma, q) \\ &= \varepsilon_j \varphi_j(\vec{r}, \sigma, q) \end{aligned} \quad (5.35)$$

Nous devons constater que la minimisation de l'énergie totale se fait par rapport aux variations de la fonction d'onde à une particule φ_j et l'énergie ε_j de chaque nucléon de type q . Pour une meilleure transparence, nous exprimons la fonctionnelle de la densité d'énergie de *Skyrme* en termes des densités neutrons et protons et non des densités isoscalaire ρ_0 et isovecteur ρ_1 . Ici nous présentons l'expression de la fonctionnelle de la densité d'énergie de *Skyrme* en fonction des densités neutrons ρ_n et protons ρ_p que l'on peut utiliser pour obtenir à travers, le potentiel central $V_q(\vec{r})$, la masse effective $f_q(\vec{r})$, le potentiel spin-orbite $\vec{W}_q(\vec{r})$ et les courants de spin.

Si nous parlons aussi de l'application de la symétrie axiale utilisée dans ce travail sur le tenseur $J_{\mu\nu}$. On montre que seul la partie radiale du vecteur antisymétrique $J^{(1)}$ reste non-nulle parmi les neuf autres (voir appendice B), dont le même résultat a également été démontré dans le cas sphérique, où les deux composantes $J^{(0)}$ et $J^{(2)}$ s'annulent. Cela permet d'écrire la fonctionnel ξ_{Sky} sous une nouvelle forme

$$\begin{aligned} \xi_{Sky}(\vec{r}) &= \sum_q \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} f_q \tau_q + (C_0^\rho + C_1^\rho) \rho_q^2 + (C_0^\rho - C_1^\rho) \rho_q \rho_{\bar{q}} \right. \\ &\quad - \left(C_0^{\Delta\rho} + C_1^{\Delta\rho} \right) (\vec{\nabla} \rho_q)^2 - \left(C_0^{\Delta\rho} - C_1^{\Delta\rho} \right) \vec{\nabla} \rho_q \cdot \vec{\nabla} \rho_{\bar{q}} \\ &\quad + \frac{1}{2} (C_0^J + C_1^J) \vec{J}_q^2 + \frac{1}{2} (C_0^J - C_1^J) \vec{J}_q \cdot \vec{J}_{\bar{q}} \\ &\quad \left. - \left[(C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \vec{\nabla} \rho_q + (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) \vec{\nabla} \rho_{\bar{q}} \right] \cdot \vec{J}_q \right\} \end{aligned} \quad (5.36)$$

Les coefficients C_t^x apparaissant dans la fonctionnelle de la densité d'énergie ξ_{Sky} ci-dessus sont liés aux paramètres $t_k, x_k, W_0, \alpha, T_E$ et T_0 de la manière suivante

$$\begin{aligned} C_0^\rho &= \frac{3}{8}t_0 + \frac{3}{48}t_0\rho_0^\alpha(\vec{r}), \quad C_1^\rho = -\frac{1}{8}t_0(2x_0+1) - \frac{1}{48}t_3(2x_3+1)\rho_0^\alpha(\vec{r}) \\ C_0^{\Delta\rho} &= \frac{1}{64}[-9t_1+t_2(4x_2+5)], \quad C_1^{\Delta\rho} = \frac{1}{64}[3t_1(2x_1+1)+t_2(2x_2+1)] \\ C_0^J &= -\frac{1}{16}[t_1(2x_1-1)+t_2(2x_2+1)-5(T_E+3T_0)] \\ C_1^J &= -\frac{1}{16}[-t_1+t_2+5(T_E-T_0)] \\ C_0^{\nabla J} &= -\frac{3}{4}W_0, \quad C_1^{\nabla J} = -\frac{1}{4}W_0 \end{aligned}$$

Les équations de HF sont obtenues dans le cas de l'interaction de *Skyrme* par dérivation fonctionnelle de l'énergie par rapport aux fonctions d'onde individuelles. On les écrit comme

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot f_q(\vec{r}) \vec{\nabla} + V_q(\vec{r}) - i \vec{W}_q(\vec{r}) \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{\sigma}) \right] \varphi_j(\vec{r}, \sigma, q) = \varepsilon_j \varphi_j(\vec{r}, \sigma, q) \quad (5.37)$$

Il s'agit d'un hamiltonien local. La non localité du potentiel moyen se trouve transférée dans le terme d'énergie cinétique par la présence d'une masse effective $f_q(\vec{r})$, où les différents termes sont définis comme

- En définissant la masse effective (en fait il s'agit du rapport de la masse du nucléon libre à sa masse effective)

$$\begin{aligned} f_q(\vec{r}) &= \frac{m}{m^*(\vec{r})} = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\delta \xi(\vec{r})}{\delta \tau_q(\vec{r})} \\ &= 1 + \frac{2m}{\hbar^2} [(C_0^\tau + C_1^\tau) \rho_q + (C_0^\tau - C_1^\tau) \rho_{\bar{q}}] . \end{aligned} \quad (5.38)$$

- Un terme potentiel central

$$\begin{aligned} V_q(\vec{r}) &= \frac{\delta \xi(\vec{r})}{\delta \rho_q(\vec{r})} \\ &= (C_0^\tau + C_1^\tau) \tau_q + (C_0^\tau - C_1^\tau) \tau_{\bar{q}} + 2 \left[(C_0^\rho + C_1^\rho) \rho_q + (C_0^\rho - C_1^\rho) \rho_{\bar{q}} \right] \\ &\quad + \left[\left(\frac{\partial C_0^\rho}{\partial \rho_0} + \frac{\partial C_1^\rho}{\partial \rho_0} \right) \rho_q^2 + \left(\frac{\partial C_0^\rho}{\partial \rho_0} - \frac{\partial C_1^\rho}{\partial \rho_0} \right) \rho_q \rho_{\bar{q}} \right] \\ &\quad + 2 \left[(C_0^{\Delta\rho} + C_1^{\Delta\rho}) \vec{\nabla}^2 \rho_q + (C_0^{\Delta\rho} - C_1^{\Delta\rho}) \vec{\nabla}^2 \rho_{\bar{q}} \right] \\ &\quad + (C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \text{div } \vec{J}_q + (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) \text{div } \vec{J}_{\bar{q}} + \delta_{q,p} V_{Coul}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (5.39)$$

$$(5.40)$$

où $\delta_{q,p}$ signifie que le potentiel *Coulombien* n'est ajouté au potentiel $V(\vec{r})$ que dans le cas des protons (p).

- Et un terme potentiel *spin-orbite* donné par

$$\vec{W}_q(\vec{r}) = \frac{\delta \xi(\vec{r})}{\delta \vec{J}_q(\vec{r})} \quad (5.41)$$

$$\begin{aligned} &= -(C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \vec{\nabla} \rho_q - (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) (\vec{\nabla} \rho_{\bar{q}}) \\ &\quad + (C_0^J + C_1^J) \vec{J}_q + (C_0^J - C_1^J) \vec{J}_{\bar{q}} \end{aligned} \quad (5.42)$$

5.5 Fonctionnelle *Semi-classique* des courants de spin en présence de l'interaction tenseur

L'utilisation de l'approximation de *HF* avec l'interaction de *Skyrme* nous permet d'exprimer l'énergie totale du noyau en fonction des divers densités. Le but recherché est d'exprimer cette énergie en fonction des densités scalaires de neutrons $\rho_n(\vec{r})$ et protons $\rho_p(\vec{r})$. A travers l'approximation *semi-classique* ce but est atteint. On présente dans cette section les résultats obtenus pour les courants de spin, obtenus par l'approche *semi-classique*.

5.5.1 Densité de courants de spin protons $\vec{J}_p$ et neutrons $\vec{J}_n$

Pour calculer les courants de spin $\vec{J}_p$ et $\vec{J}_n$ qui sont fonctionnelle des densités de particules ρ_q et de ses dérivées $\vec{\nabla} \rho_q$ dans notre approche *semi-classique*. On rappelle qu'à l'ordre $\hbar^2$, la fonctionnelle densité *spin-orbite* s'exprime comme

$$\vec{J}_q = -\frac{2m}{\hbar^2 f_q} \rho_q \vec{W}_q \quad (5.43)$$

Maintenant, en remplaçant $\vec{W}_q$ par son expression donnée par l'équation (5.42) dans l'expression ci-dessus, cette dernière relation permet de réécrire le courant $\vec{J}_q(\vec{r})$ comme

$$\begin{aligned} \vec{J}_q &= -\frac{2m}{\hbar^2 f_q} \rho_q \left[(C_0^J + C_1^J) \vec{J}_q + (C_0^J - C_1^J) \vec{J}_{\bar{q}} \right. \\ &\quad \left. - (C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \vec{\nabla} \rho_q - (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) (\vec{\nabla} \rho_{\bar{q}}) \right] \end{aligned} \quad (5.44)$$

Une fois donc déterminer, les différentes grandeurs $f_q, \rho_q, \vec{\nabla} \rho_q$, le calcul des courants $\vec{J}_n$ et $\vec{J}_p$ se fait par résolution du système d'équations suivant

$$\begin{cases} \left[\frac{\hbar^2}{2m} f_n + (C_0^J + C_1^J) \rho_n \right] \vec{J}_n + (C_0^J - C_1^J) \rho_n \vec{J}_p = (C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \rho_n \vec{\nabla} \rho_n + (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) \rho_n \vec{\nabla} \rho_p \\ \left[\frac{\hbar^2}{2m} f_p + (C_0^J + C_1^J) \rho_p \right] \vec{J}_p + (C_0^J - C_1^J) \rho_p \vec{J}_n = (C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \rho_p \vec{\nabla} \rho_p + (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) \rho_p \vec{\nabla} \rho_n \end{cases} \quad (5.45)$$

Pour obtenir une expression explicite de ces quantités locales, il est possible d'effectuer l'inverse d'une matrice. On peut réécrire (5.45) après simplification comme suit

$$\begin{pmatrix} \vec{J}_n \\ \vec{J}_p \end{pmatrix} = \frac{1}{\det(A)} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix} \vec{\nabla} \begin{pmatrix} \rho_n \\ \rho_p \end{pmatrix} \quad (5.46)$$

où les c_{ij} representent le produit de deux matrices (voir appendice C), et le déterminant de la matrice A s'exprime comme

$$\det(A) = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 f_n f_p + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) (C_0^J + C_1^J) (\rho_p f_n + \rho_n f_p) + 4C_0^J C_1^J \rho_p \rho_n \quad (5.47)$$

Nous donnerons ici le résultat final

$$\begin{aligned} \vec{J}_n &= \frac{1}{\det(A)} \left(\left[\frac{\hbar^2}{2m} (C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \rho_n f_p + 2(C_1^{\nabla J} C_0^J + C_0^{\nabla J} C_1^J) \rho_n \rho_p \right] \vec{\nabla} \rho_n \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{\hbar^2}{2m} (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) \rho_n f_p + 2(C_0^{\nabla J} C_1^J - C_1^{\nabla J} C_0^J) \rho_n \rho_p \right] \vec{\nabla} \rho_p \right) \end{aligned} \quad (5.48)$$

et

$$\begin{aligned} \vec{J}_p &= \frac{1}{\det(A)} \left(\left[\frac{\hbar^2}{2m} (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) \rho_p f_n + [2(C_0^{\nabla J} C_1^J - C_1^{\nabla J} C_0^J) \rho_n \rho_p] \right] \vec{\nabla} \rho_n \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{\hbar^2}{2m} (C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \rho_p f_n + 2(C_1^{\nabla J} C_0^J + C_0^{\nabla J} C_1^J) \rho_n \rho_p \right] \vec{\nabla} \rho_p \right) \end{aligned} \quad (5.49)$$

Chapitre 6

Conclusion

Les études réalisées dans cette thèse sont partagées en deux grandes parties. La première partie consiste en l'application de la méthode *semi-classique* à un système de fermions sans interactions confiné par un potentiel en considérant une situation plus générale où l'Hamiltonien contient une masse effective spatialement variable. En effet, suite aux progrès technologiques réalisés dans le domaine de gaz quantiques, ces systèmes fournissent un milieu contrôlable et accessible pour tester la validité des théories élaborées initialement pour des systèmes de matière condensée dans lesquelles ces vérifications ne sont pas toujours faciles.

Nous avons donné tout d'abord une vue générale sur la méthode *semi-classique* en introduction. En fait la méthode semi-classique dans sa version extended *Thomas-Fermi* peut être vue comme une approximation de la théorie exacte qui est la théorie de la fonctionnelle de la densité (*DFT*). Cette théorie est brièvement exposée en discutant les versions de *Hohenberg-Kohn* (*HK*) et de *Kohn-Sham* (*KS*).

Le chapitre 3 n'a été consacré exclusivement à l'aspect *semi-classique* du problème. La matrice densité réduite d'ordre un à une dimension $1d$ d'un système de N fermions sans interactions ayant un Hamiltonien avec une masse effective spatialement variable est examinée. En effet cette grandeur est importante puisque dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (*DFT*) et dans sa version de *Kohn-Sham* l'énergie cinétique totale et l'énergie d'échange s'expriment en fonction de cette matrice densité réduite. Nous avons utilisé la méthode *semi-classique* de *Grammaticos-Voros* pour calculer la matrice densité et nous avons obtenu une

expression analytique jusqu'à l'ordre $\hbar^2$ et bien hermitique même en présence des termes de masse effective dépendants de la position. Afin de vérifier et avoir une bonne confiance dans notre expression, nous avons fait le test suivant. Il consiste à retrouver la fonctionnelle de l'énergie cinétique totale du système connue dans la littérature. Dans le cas des Hamiltoniens avec une masse effective constante, nous avons proposé une généralisation de l'expression analytique en dérivant une expression unique de la matrice densité réduite *semi-classique* en fonction de la dimension $d = 1, 2, 3, 4$ de l'espace considéré.

A cause de son intérêt en mécanique quantique nous nous sommes intéressés au propagateur de *Bloch* $e^{-\gamma H}$ et en particulier pour un hamiltonien H ayant une masse effective dépendante de la position x de la particule. Nous avons obtenue l'expression *semi-classique* jusqu'à l'ordre $\hbar^2$ de ce propagateur en représentation position à une dimension $C(x, x'; \gamma)$ pour un système de fermions confiné dans un potentiel arbitraire $V(x)$. Nous avons vérifié que notre développement *semi-classique* n'est qu'une limite d'un calcul exact du propagateur de *Bloch* pour le cas d'un oscillateur harmonique, si nous faisant un développement de *Taylor*, par rapport à la constante de planck $\hbar$, du propagateur exact connu pour ce cas. Nos résultats sont aussi analogues à ceux obtenus pour la partie diagonale par les auteurs de la référence [58].

La seconde partie de cette thèse a porté sur une étude dans le domaine de la physique nucléaire qui a suscité ces dernières années un grand intérêt dans la structure nucléaire, à savoir l'effet du terme tenseur dans l'interaction de nucléon-nucléon de type *Skyrme*. Nous avons étudié l'effet du terme tenseur sur les propriétés du noyau dans le cas d'un potentiel moyen présentant la symétrie axiale (le cas en symétrie sphérique a été examiné récemment), dans le cadre de l'approche de *Hartree-Fock* combinée avec la méthode *semi-classique* de *Thomas-Fermi* étendue. Nous avons calculé les densités courants de spin engendrés par l'addition des effets du terme tenseur dans l'interaction.

Les études que nous avons mené dans cette thèse peuvent donner lieu à plusieurs extensions. Par exemple utiliser nos matrices densités *semi-classiques* pour le calcul de l'énergie d'échange. Inclusion des effets de la température dans l'expression de la matrice densité. Extension de cette étude au cas d'un gaz de bosons.

Chapitre 7

Annexe A : Matrice densité à d=4

Dans cet appendice, on va calculer la matrice densité réduite pour un espace de dimension $d = 4$, on adapte toujours la méthode *semi-classique* de *Grammaticos et Voros*.

On écrits tout d'abord la transformation de *Wigner* de la matrice densité réduite $\rho_{d=4}(\vec{r}, \vec{r}')$ pour un système à quatre dimensions comme

$$\rho_{d=4}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^4} \int d^4p \exp\left(\frac{i\vec{p} \cdot \vec{s}}{\hbar}\right) \rho_W(\vec{R}, \vec{p}) \quad (7.1)$$

On va par conséquent remplacer l'expression de $\rho_W(\vec{R}, \vec{p})$ donnée par (3.7), dans l'équation (7.1) qui devient

$$\rho_{d=4}(\vec{r}, \vec{r}') = A + B + C + D \quad (7.2)$$

où A represente la matrice densité à l'ordre de *Thomas-Fermi*, soit

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^4} \int d^4p \exp\left(\frac{i\vec{p} \cdot \vec{s}}{\hbar}\right) \theta(\lambda - H_c) \\ &= \frac{g}{(2\pi\hbar)^4} \int_0^{p_f} p^3 dp \int_0^\pi \sin^2 \theta_1 e^{\frac{i\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}} d\theta_1 \int_0^\pi \sin \theta_2 d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\theta_3 \end{aligned} \quad (7.3)$$

On a utilisé $d^4p = p^3 \sin^2(\theta_1) \sin(\theta_2) dp d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3$. Pour effectuer l'integration ci-dessus on réécrit l'intégrale $I(p)$

$$\begin{aligned} I(p) &= \frac{\hbar}{ips} \int_0^\pi \cos \theta e^{\frac{ips}{\hbar} \cos \theta} d\theta \\ &= \frac{\hbar}{ips} \frac{\partial}{\partial s} \int_0^\pi \left(\frac{\hbar}{ip}\right) e^{\frac{ips \cos \theta}{\hbar}} d\theta \end{aligned}$$

qui donne le résultat suivant

$$I(p) = \int_0^\pi \sin^2 \theta e^{\frac{i\mathbf{ps} \cos \theta}{\hbar}} d\theta = -\hbar^2 \frac{\pi}{s} \frac{\partial}{\partial s} \left[\frac{1}{p^2} J_0\left(\frac{ps}{\hbar}\right) \right] \quad (7.4)$$

et par conséquent le terme A s'écrit en fonction de la fonction de *Bessel*, donc

$$A = -\frac{g}{(2\pi\hbar)^2} \frac{1}{s} \frac{\partial}{\partial s} \int_0^{p_F} p dp J_0\left(\frac{ps}{\hbar}\right) = \frac{k_F^4}{(2\pi)^2} \frac{J_2(z)}{z^2} \quad (7.5)$$

où on a introduit la variable $z = \frac{p_F s}{\hbar} = k_F s$ et la fonction de *Bessel* J_2 .

Maintenant pour calculer les trois termes de corrections B, C et D , on suit les mêmes étapes utilisées auparavant dans le calcul de la matrice densité à $2d$ et à $3d$. Les trois termes de corrections B, C et D à l'ordre $\hbar^2$, sont données respectivement

$$B = \frac{g}{(2\pi\hbar)^4} \left(\frac{\hbar^2}{8m} \right) \left(\vec{\nabla}_R^2 V \right) \int d^4 p e^{\frac{i\mathbf{ps}}{\hbar}} \frac{d\delta(H_{cl} - E_F)}{dH_{cl}} \quad (7.6)$$

$$C = \frac{g}{(2\pi\hbar)^4} \left(\frac{\hbar^2}{24m} \right) \left(\vec{\nabla}_R V \right)^2 \int d^4 p e^{\frac{i\mathbf{ps}}{\hbar}} \frac{d^2\delta(H_{cl} - E_F)}{dH_{cl}^2} \quad (7.7)$$

$$D = \frac{g}{(2\pi\hbar)^4} \left(\frac{\hbar^2}{24m^2} \right) \int d^4 p e^{\frac{i\mathbf{ps}}{\hbar}} \left[(\vec{p} \cdot \vec{\nabla}_R)^2 V \right] \frac{d^2\delta(H_{cl} - E_F)}{dH_{cl}^2} \quad (7.8)$$

Pour effectuer l'intégration ci-dessus on utilise d'abord les relations

$$\frac{d\delta(H_{cl} - E_F)}{dH_{cl}} = \frac{m^2}{pp_F} \frac{d\delta(p - p_F)}{dp} \quad (7.9)$$

$$\frac{d^2\delta(H_{cl} - E_F)}{dH_{cl}^2} = \frac{m^3}{p_F} \left[\frac{1}{p^2} \frac{d^2\delta(p - p_F)}{dp^2} - \frac{1}{p^3} \frac{\delta'(p - p_F)}{dp} \right] \quad (7.10)$$

qui remplace la dérivée par rapport à H_{cl} par une dérivée par rapport à p qui donne le résultat suivant

$$\begin{aligned} B &= -g \frac{m \left(\vec{\nabla}_R^2 V \right)}{32\pi^2 p_F s} \frac{\partial}{\partial s} \int_0^\infty dp \frac{d\delta(p - p_F)}{dp} J_0\left(\frac{ps}{\hbar}\right) \\ C &= -g \frac{m^2}{96\pi^2 p_F s} \left(\vec{\nabla}_R V \right)^2 \frac{\partial}{\partial s} \int_0^\infty p dp \left[\frac{1}{p^2} \frac{d^2\delta(p - p_F)}{dp^2} - \frac{1}{p^3} \frac{d\delta(p - p_F)}{dp} \right] J_0\left(\frac{ps}{\hbar}\right) \end{aligned}$$

Après intégration sur p , on obtient donc

$$B = -g \frac{m \left(\vec{\nabla}_R^2 V \right)}{32\pi^2 \hbar^2 z} \frac{\partial}{\partial z} [z J_1(z)] = -g \frac{m \left(\vec{\nabla}_R^2 V \right)}{32\pi^2 \hbar^2} J_0(z) \quad (7.11a)$$

$$C = -g \frac{m^2 \left(\vec{\nabla}_R V \right)^2}{96\pi^2 k_F^2 \hbar^4} z J_1(z) \quad (7.11b)$$

Pour calculer la quantité D , nous écrivons le terme $(\vec{p} \vec{\nabla}_R)^2 V$ en utilisant les coordonnées du centre de masse $\vec{R} = \frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2}$ et coordonnée relative $\vec{s} = \vec{r} - \vec{r}'$, sous la forme

$$(\vec{p} \vec{\nabla}_R)^2 V = \sum_{i,j=1}^4 p_i p_j \frac{\partial^2 V}{\partial X_i \partial X_j} \quad (7.12)$$

Où p_i désigne la $i^{\text{ème}}$ composante de $\vec{p}$ et de même X_i est la de $i^{\text{ème}}$ composante de $\vec{R}$. On peut donc écrire

$$D = -\frac{g \cdot 4\pi}{(2\pi\hbar)^4} \left(\frac{\hbar^2}{24m^2} \right) \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^4 \left[\frac{\partial^2 V}{\partial X_i \partial X_j} \frac{\partial^2}{\partial s_i \partial s_j} \right] \int p^3 dp \int_0^\pi \sin^2 \theta e^{\frac{i\mathbf{ps} \cos \theta}{\hbar}} \frac{d^2 \delta(H_{cl} - E_F)}{dH_{cl}^2} \quad (7.13)$$

En insérant la relation (7.10) dans (7.13) et en écrivant comme $D = D_1 - D_2$

avec

$$\begin{aligned} D_1 &= -\frac{g \cdot 4m\hbar^2}{24(2\pi\hbar)^4} \left(\frac{1}{p_F} \right) \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^4 \left[\frac{\partial^2 V}{\partial X_i \partial X_j} \frac{\partial^2}{\partial s_i \partial s_j} \right] \int p^3 dp \int_0^\pi \sin^2 \theta e^{\frac{i\mathbf{ps} \cos \theta}{\hbar}} \frac{\delta''(p - p_F)}{p^2} \\ D_2 &= -\frac{g \cdot 4m\hbar^2}{24(2\pi\hbar)^4} \left(\frac{1}{p_F} \right) \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^4 \left[\frac{\partial^2 V}{\partial X_i \partial X_j} \frac{\partial^2}{\partial s_i \partial s_j} \right] \int p^3 dp \int_0^\pi \sin^2 \theta e^{\frac{i\mathbf{ps} \cos \theta}{\hbar}} \frac{\delta'(p - p_F)}{p^3} \end{aligned}$$

et si on note que

$$p_i p_j e^{\frac{i\mathbf{ps}}{\hbar}} = \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial s_i \partial s_j} e^{\frac{i\mathbf{ps}}{\hbar}}$$

nous obtenons après calcul l'expression de D

$$D = g \frac{m}{96\pi^2 k_f^2 \hbar^2} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \left[\frac{\partial^2 V}{\partial X_i \partial X_j} \frac{\partial^2}{\partial s_i \partial s_j} \right] [z J_1(z)] \quad (7.14)$$

Finalement, nous utilisons les relations suivantes

$$\begin{aligned} \frac{\partial s}{\partial s_i} &= \frac{s_i}{s} \quad \text{et} \quad \frac{\partial}{\partial s_i} = \frac{s_i}{s} \frac{\partial}{\partial s} \\ \frac{\partial^2}{\partial s_i \partial s_j} &= \left(\frac{\delta_{ij}}{s} - \frac{s_i s_j}{s^3} \right) \frac{\partial}{\partial s} + \frac{s_i s_j}{s^3} \frac{\partial^2}{\partial s^2} \end{aligned}$$

Pour obtenir l'expression finale de D

$$D = -\frac{g}{96 \cdot 2 \cdot \pi^2} (\nabla_R^2 k_F^2) J_0(z) + \frac{g}{96 \cdot 2 \cdot \pi^2} \left(\vec{\nabla}_R \left(\vec{\nabla}_R V \cdot \frac{\vec{s}}{s} \right) \cdot \frac{\vec{s}}{s} \right) z J_1(z) \quad (7.15)$$

Si on reporte les résultats des Eqs (7.5), (7.11a), (7.11b) et (7.15) dans l'équation (7.2) on trouve le résultat final de l'expression de la matrice densité réduite d'ordre un $\rho_{d=4}(\vec{r}, \vec{r}')$ obtenue à 4d jusqu'à l'ordre $\hbar^2$.

Chapitre 8

Annexe B : Tenseur en symétrie axiale

Suivant les propriétés de transformation par rotation, la densité tenseur spin-courant $J_{\mu\nu}(\vec{r})$ s'écrit

$$J_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{1}{3}\delta_{\mu\nu}J^{(0)}(\vec{r}) + \frac{1}{2}\sum_{\lambda}\epsilon_{\mu\nu\lambda}J_{\lambda}^{(1)}(\vec{r}) + J_{\mu\nu}^{(2)}(\vec{r}) \quad (8.1)$$

où leurs composantes $J^{(0)}(\vec{r})$, $J_{\lambda}^{(1)}(\vec{r})$, $J_{\mu\nu}^{(2)}(\vec{r})$ sont définies par les équations (5.27), (5.28), (5.29) respectivement. Nous allons maintenant traiter les deux cas, $\mu = \nu$ et $\mu \neq \nu$.

D'abord pour le cas $\mu = \nu$, le deuxième terme $J^{(1)}(\vec{r})$ disparaîtra (à cause du tenseur *Levi-Civita*) et les autres termes $J^{(0)}(\vec{r})$, $J_{\mu\nu}^{(2)}(\vec{r})$ prennent la forme suivante

$$J^{(0)}(\vec{r}) = \sum_{\mu=x}^z J_{\mu\mu}(\vec{r}) \quad (8.2)$$

$$J_{\mu\nu}^{(2)}(\vec{r}) = \frac{1}{2}[J_{\mu\mu}(\vec{r}) + J_{\nu\nu}(\vec{r})] - \frac{1}{3}\sum_{\mu=x}^z J_{\mu\mu}(\vec{r}) \quad (8.3)$$

$$= J_{\mu\mu}(\vec{r}) - \frac{1}{3}J^{(0)}(\vec{r}) \quad (8.4)$$

donc la densité tenseur spin-courant $J_{\mu\nu}$ s'écrit alors

$$\begin{aligned} J_{\mu\nu}(\vec{r}) &= \frac{1}{3}J^{(0)}(\vec{r}) + J_{\mu\nu}^{(2)}(\vec{r}) \\ &= \frac{1}{3}J^{(0)}(\vec{r}) + J_{\mu\mu}(\vec{r}) - \frac{1}{3}J^{(0)}(\vec{r}) \\ &= J_{\mu\mu}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (8.5)$$

et peut être réécrite aussi sous la forme

$$J_{\mu\nu}(\vec{r}) = \sum_{\mu=x}^z J_{\mu\mu}(\vec{r}) = J_{q\mu\nu}^{(0)}(\vec{r}) \quad (8.6)$$

Notant que $q = n, p$. Passons maintenant à la partie paire de la fonctionnelle *Skyrme* dans le même cas ($\mu = \nu$),

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_n}{\rho_n} + 2C_+^T \right] J_{n\mu\nu} + C_+^F J_{n\nu\mu} + C_+^F J_{nkk} + 2C_-^T J_{p\mu\nu} + 2C_-^F J_{p\nu\mu} + C_-^F J_{pkk} \delta_{\mu\nu} \\ &= \epsilon_{k\mu\nu} C_+^{\nabla J} \nabla_k \rho_n - \epsilon_{k\mu\nu} C_-^{\nabla J} \nabla_k J_n = 0 \end{aligned} \quad (8.7)$$

On pose $\mu = x$ pour simplifier l'écriture de l'expression

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_n}{\rho_n} + 2C_+^T \right] J_{nxx} + C_+^F J_{nxx} + C_+^F J_n^{(0)} + 2C_-^T J_{pxx} + 2C_-^F J_{pxx} + C_-^F J_p^{(0)} = 0 \quad (8.8)$$

On obtient la même forme pour $\mu = y, z$. Nous pouvons réorganiser ces équations comme suit

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_n}{\rho_n} + 2C_+^T + C_+^F \right] J_{nxx} + [2C_-^T + C_-^F] J_{pxx} + C_+^F J_n^{(0)} + C_-^F J_p^{(0)} = 0 \quad (8.9)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_n}{\rho_n} + 2C_+^T + C_+^F \right] J_{nyy} + [2C_-^T + C_-^F] J_{pyy} + C_+^F J_n^{(0)} + C_-^F J_p^{(0)} = 0 \quad (8.10)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_n}{\rho_n} + 2C_+^T + C_+^F \right] J_{nzz} + [2C_-^T + C_-^F] J_{pzz} + C_+^F J_n^{(0)} + C_-^F J_p^{(0)} = 0 \quad (8.11)$$

la somme des équations (8.9), (8.10) et (8.11) nous amène à l'expression ci-dessous

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_n}{\rho_n} + 2C_+^T + C_+^F \right] J_n^{(0)} + [2C_-^T + C_-^F] J_p^{(0)} + 3C_+^F J_n^{(0)} + 3C_-^F J_p^{(0)} = 0 \quad (8.12)$$

avec les mêmes étapes précédemment utilisées pour $q = n$, nous trouvons la fonction de *Skyrme* pour $q = p$, en obtenant un système d'équations linéaires

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_n}{\rho_n} + 2C_+^T + 4C_+^F \right] J_n^{(0)} + [2C_-^T + 4C_-^F] J_p^{(0)} = 0 \quad (8.13)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_p}{\rho_p} + 2C_+^T + 4C_+^F \right] J_p^{(0)} + [2C_-^T + 4C_-^F] J_n^{(0)} = 0 \quad (8.14)$$

ce système d'équation peut prendre la forme matricielle

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_n}{\rho_n} + 2C_+^T + 4C_+^F & 2C_-^T + 4C_-^F \\ 2C_-^T + 4C_-^F & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_p}{\rho_p} + 2C_+^T + 4C_+^F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_n^{(0)} \\ J_p^{(0)} \end{pmatrix} = 0$$

et on trouve

$$J_q^{(0)} = \sum_{\mu=x}^z J_{\mu\mu}(\vec{r}) = J_{qxx} + J_{qyy} + J_{qzz} = 0 \quad (8.15)$$

Cas où $\mu \neq \nu$. Le terme tenseur s'écrit alors

$$J_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \epsilon_{\mu\nu\lambda} J_{\lambda}^{(1)}(\vec{r}) + J_{\mu\nu}^{(2)}(\vec{r}) \quad (8.16)$$

posant $\mu\nu = xy$

$$J_{xy}^{(2)}(\vec{r}) = \frac{1}{2} [J_{xy}(\vec{r}) + J_{yx}(\vec{r})] = J_{yx}^{(2)}(\vec{r}) \quad (8.17)$$

Où

$$J_{xy}(\vec{r}) = \frac{1}{2} J_{nz}^{(1)}(\vec{r}) + J_{xy}^{(2)}(\vec{r}) \quad (8.18)$$

$$J_{yx}(\vec{r}) = -\frac{1}{2} J_{nz}^{(1)}(\vec{r}) + J_{xy}^{(2)}(\vec{r}) \quad (8.19)$$

En remplaçant dans l'expression de la densité de la fonctionnelle de *Skyrme*

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_n}{\rho_n} + 2C_+^T \right] \left(\frac{1}{2} J_{nz}^{(1)} + J_{xy}^{(2)} \right) + C_+^F \left(-\frac{1}{2} J_{nz}^{(1)} + J_{xy}^{(2)} \right) + 2C_-^T \left(\frac{1}{2} J_{pz}^{(1)} + J_{pxy}^{(2)} \right) \\ & + C_-^F \left(-\frac{1}{2} J_{pz}^{(1)} + J_{pxy}^{(2)} \right) = -C_+^{\nabla J} \nabla_z \rho_n - C_-^{\nabla J} \nabla_z \rho_p \end{aligned} \quad (8.20)$$

et pour $\mu\nu = yx$

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_n}{\rho_n} + 2C_+^T \right] \left(-\frac{1}{2} J_{nz}^{(1)} + J_{xy}^{(2)} \right) + C_+^F \left(\frac{1}{2} J_{nz}^{(1)} + J_{xy}^{(2)} \right) + 2C_-^T \left(-\frac{1}{2} J_{pz}^{(1)} + J_{pxy}^{(2)} \right) \\ & + C_-^F \left(\frac{1}{2} J_{pz}^{(1)} + J_{pxy}^{(2)} \right) = C_+^{\nabla J} \nabla_z \rho_n + C_-^{\nabla J} \nabla_z \rho_p \end{aligned} \quad (8.21)$$

alors la somme des équations (8.20) et (8.21) conduit au résultat suivant

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_n}{\rho_n} + 2C_+^T + C_+^F \right] J_{nxy}^{(2)} + (2C_-^T + C_-^F) J_{pxy}^{(2)} = 0 \quad (8.22)$$

et la soustraction des équations (8.20) et (8.21) conduit au résultat suivant

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_n}{\rho_n} + 2C_+^T - C_+^F \right] J_{nz}^{(1)} + (C_-^T - C_-^F) J_{pz}^{(1)} \\ & = -2C_+^{\nabla J} \nabla_z \rho_n - 2C_-^{\nabla J} \nabla_z \rho_p \end{aligned} \quad (8.23)$$

Ce qui implique

$$\begin{aligned} J_{nxy}^{(2)} &= J_{pxy}^{(2)} = 0 \\ J_{xz}^{(2)} &= J_{zx}^{(2)} = J_{yz}^{(2)} = 0 \end{aligned}$$

Chapitre 9

Annexe C : Calcul des courants de spin

Comme nous l'avons mentionné précédemment, nous allons détailler la solution des équations linéaires définies par le système d'équations (5.45) dans lesquelles nous avons finalement trouvé les expressions de la densité de courant de spin des protons et neutrons pour l'interaction à deux corps en présence d'un terme tenseur. Nous commençons par leur expression sous la forme matricielle

$$\begin{pmatrix} \vec{J}_n \\ \vec{J}_p \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix}}_A^{-1} \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{pmatrix} \vec{\nabla} \begin{pmatrix} \rho_n \\ \rho_p \end{pmatrix} \quad (9.1)$$

Avant de calculer la matrice inverse A , il faut définir les différents éléments α_{ij} et β_{ij} ,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \vec{J}_n \\ \vec{J}_p \end{pmatrix} &= \left\{ \begin{pmatrix} \left[\frac{\hbar^2}{2m} f_n + (C_0^J + C_1^J) \rho_n \right] & (C_0^J - C_1^J) \rho_n \\ (C_0^J - C_1^J) \rho_p & \left[\frac{\hbar^2}{2m} f_p + (C_0^J + C_1^J) \rho_p \right] \end{pmatrix}^{-1} \right. \\ &\quad \times \left. \begin{pmatrix} (C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \rho_n & (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) \rho_n \\ (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) \rho_p & (C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \rho_p \end{pmatrix} \vec{\nabla} \begin{pmatrix} \rho_n \\ \rho_p \end{pmatrix} \right\} \end{aligned} \quad (9.2)$$

mathématiquement, l'opération de calcul de la matrice inverse est définie comme suit

$$\begin{aligned} A^{-1} &= \frac{1}{\det(A)} \begin{pmatrix} \alpha_{22} & -\alpha_{12} \\ -\alpha_{21} & \alpha_{11} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\det(A)} \begin{pmatrix} \left[\frac{\hbar^2}{2m} f_p + (C_0^J + C_1^J) \rho_p \right] & -(C_0^J - C_1^J) \rho_n \\ -(C_0^J - C_1^J) \rho_p & \left[\frac{\hbar^2}{2m} f_n + (C_0^J + C_1^J) \rho_n \right] \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (9.3)$$

après un calcul et une simplification, nous avons d'abord trouvé le déterminant de A défini par l'équation (5.47) et l'expression (9.1) devient

$$\begin{pmatrix} \vec{J}_n \\ \vec{J}_p \end{pmatrix} = \frac{1}{\det(A)} \left\{ \begin{pmatrix} \left[\frac{\hbar^2}{2m} f_p + (C_0^J + C_1^J) \rho_p \right] & -(C_0^J - C_1^J) \rho_n \\ -(C_0^J - C_1^J) \rho_p & \left[\frac{\hbar^2}{2m} f_n + (C_0^J + C_1^J) \rho_n \right] \end{pmatrix} \right. \\ \left. \times \begin{pmatrix} (C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \rho_n & (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) \rho_n \\ (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) \rho_p & (C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \rho_p \end{pmatrix} \vec{\nabla} \begin{pmatrix} \rho_n \\ \rho_p \end{pmatrix} \right\} \quad (9.4)$$

Effectuant maintenant le produit de deux matrices ci-dessus. Par conséquent

$$\begin{pmatrix} \vec{J}_n \\ \vec{J}_p \end{pmatrix} = \frac{1}{\det(A)} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix} \vec{\nabla} \begin{pmatrix} \rho_n \\ \rho_p \end{pmatrix} \quad (9.5)$$

où les éléments c_{ij} sous leur forme explicite sont donnés par,

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} (C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \rho_n f_p + 2(C_1^{\nabla J} C_0^J + C_0^{\nabla J} C_1^J) \rho_n \rho_p & \frac{\hbar^2}{2m} (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) \rho_n f_p + 2(C_0^{\nabla J} C_1^J - C_1^{\nabla J} C_0^J) \rho_n \rho_p \\ 2(C_0^{\nabla J} C_1^J - C_1^{\nabla J} C_0^J) \rho_n \rho_p + \frac{\hbar^2}{2m} (C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}) \rho_p f_n & \frac{\hbar^2}{2m} (C_0^{\nabla J} + C_1^{\nabla J}) \rho_p f_n + 2(C_1^{\nabla J} C_0^J + C_0^{\nabla J} C_1^J) \rho_n \rho_p \end{pmatrix}$$

Ce qui nous ramène aux résultats finaux des densités de spin-courant $\vec{J}_n(\vec{r})$ et $\vec{J}_p(\vec{r})$ données par les équations (5.48) et (5.49).

Bibliographie

- [1] D. S. Dean, P.L. Doussal, S.N. Majumdar and G. Schehr, Europhys. Lett. **112**, 60001 (2015).
- [2] D.S. Dean, P.L. Doussal, S.N. Majumdar, and G. Schehr, arXiv : 1801.02680 v1 [cond-mat.stat-mech] (8 Jan 2018).
- [3] B. Lacroix-A-Chez-Toine, P. Le Doussal, S.N. Majumdar and G. Schehr, arXiv :1806.07481v1 [cond-mat.stat-mech] (19 Jun 2018).
- [4] M. Rigol, V. Dunjko, V. Yurovsky and M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **98**, 050405 (2007).
- [5] M. Collura, S. Sotiriadis, and P. Calabrese, Phys. Rev. Lett. **110**, 245301 (2013).
- [6] S. Giorgini, L.P. Pitaevski and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **80**, 1215 (2008).
- [7] I. Bloch, J. Dalibard and W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).
- [8] E. Bettelheim and L. Glazman, Phys. Rev. Lett. **109**, 260602 (2012).
- [9] E. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
- [10] J. G. Kirkwood, Phys. Rev. **44**, 31 (1933).
- [11] D. A. Kirzhnits Field Theoretical Methods in Many-Body System, (Pergamon, London, 1967).
- [12] B. Grammaticos and A. Voros, Ann. Phys. **123**, 359 (1979).
- [13] L.H. Thomas, Proc. Cambridge Philos. Soc. **23** 542 (1927) .
- [14] E. Fermi. Z. Phys, **48** : i 3 (1928).
- [15] K. Bencheikh and E. Räsänen, J. Phys. A Math. Theor. **49**, 015205 (2016).
- [16] K. Bencheikh, B. P. Van Zyl and K. Berkane, Phys. Rev. **B 94**, 075423 (2016).

-
- [17] G. Bastard, Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructure, Les Editions de Physique, Les Ulis, France, (1988).
- [18] Y. Redjati, K. Berkane, K. Bencheikh, Journal of Physics and Chemistry of Solids, **134**, 313-318 (2019).
- [19] L. Serra and E. Lipparini, Europhys. Lett. **40**, 667 (1997); P. Harrison, Quantum Wells, Wires and Dots, John Wiley and Sons, (2000).
- [20] M. Barranco M. Pi, S. M. Gatica, E.S. Hernández, and J. Navarro, Phys. Rev. **B 56**, 8997 (1997); T. Gora and F. Williams, Phys. Rev. **177**, 11979 (1969).
- [21] F. Arias de Saavedra, J. Boronat, A. Polls and A. Fabrocini, Phys. Rev. **B 50**, 4248 (1994).
- [22] Hohenberg. W. Kohn. Phys. Rev. **B 136**, 864 (1964).
- [23] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **A 140**, 1133 (1965).
- [24] K. Berkane and K. Bencheikh Phys. Rev. **A 72**, 022508 (2005).
- [25] V. A. Fock, Zeit, Phys. **61** 89 (1930).
- [26] D. R. Hartree, Proc. Cam. Phil. Soc, **24**, 89 (1928).
- [27] I. Kelson, Phys. Rev. **132**, 2189 (1963).
- [28] B. J. C. Slater, Phy. Rev. **32** (1928).
- [29] K. U. Gross and R. M. Dreizler, Z. Phys. **A 302**, 103. P.S (1981).
- [30] S. Pittalis, E. Räsänen and E K. U. Gross, Phys. Rev. **A 80**, 032515 (2009); S. Pittalis and E. Räsänen, Phys. Rev. **B 82**, 165123 (2010).
- [31] R. M. Dreizler and E. K. U. Gross, Density Functional Theory : An Approach to the Quantum Many-Body Problem (Springer-Verlag, Berlin, Germany 1990).
- [32] R. G. Parr and W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules (Oxford University Press, (1989).
- [33] D. Gillespie, W. Nonner and R. S. Eisenberg, J. Phys. Condens. Matter **14**, 12129 (2002).
- [34] R. M. Dreizeler : Relativistic Density Functional Theory pp. 123-143 (Springer, Germany 2003).

-
- [35] K. Burke, J. P. Perdew and Y. Wang, in *Electronic Density Functional Theory : Recent Progress and New Directions*, edited by J. F. Dobson, G. Vignale and M. P. Das (Plenum, NY, 1998).
- [36] J. P. Perdew and W. Yang, *Phys. Rev.* **B 33**, 8800 (1986).
- [37] J.W. Negele, *Phys. Rev.* **C 1**, 1260 (1970).
- [38] J.W. Negele, *Phys. Rev.* **C 5**, 1470 (1972).
- [39] A. Charay, *J. Chem. Phys.* **B 30**, 2223 (1984).
- [40] A. Putaja, E. Räsänen, R. van Leeuwen, J. G. Vilhena, and M. A. L. Marques, *Phys. Rev.* **B 85**, 165101(2012).
- [41] M. Brack and R. K. Bhaduri, *Semiclassical Physics*, *Frontiers in Physics* 96 (West-view Boulder, Co, 2003).
- [42] Brandon P. van zyl, *Phys. Rev.* **A68**, 033601 (2003).
- [43] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, 9th ed. Dover Publications, New York, 1970
- [44] A D. Alhaidari, *Phys. Rev.* **A 66**, 042116 (2002).
- [45] N. Bouchemla and L. Chetouani, *Acta Physica Polonica* **B 40**, 2711 (2009).
- [46] R. Khordad, *Eur. Phys. J.* **B 85**, 114 (2012) ; R. Khordad, *Physica* **B 406**, 3911 (2011).
- [47] W. Kohn, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253 (1999).
- [48] L. Vidmar and M. Rigol, *J. Stat. Mech.* 064007 (2016).
- [49] L. Pollack and J. P. Perdew, *J. Phys. Condens. Matter* **12**, 1239 (2000).
- [50] L. A. Constantin, J. P. Perdew and J. M. Pitarke, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 016406 (2008).
- [51] E. Räsänen, S. Pittalis, G. Bekçioğlu and I. Makkonen, *Phys. Rev.* **B 87**, 035144 (2013).
- [52] E. Räsänen, S. Pittalis, J. G. Vilhena and M. A. L. Marques, *Int. J. Quantum Chem.* **110**, 2308 (2010).
- [53] T. T. Chau, J. H. Hue, M-I. Trappe and B.-G. Englert, *New J. Phys.* **20**, 073003 (2018).
- [54] Medjdel Soheyb, Thèse de Doctorat en Sciences, Physique théorique, "Calcul des Densités de Courants dans les systèmes Quantiques Confinés par des Pièges Harmonique en Dimensions Réduites" (2015).

-
- [55] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully and E. P. Wigner, Phys. Rep. **106**, 121 (1984).
- [56] E. Fermi, Rend. Accad. Lincei, 6, pp. 602 (1927).
- [57] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, Table of integrals, series and products, Seventh edition
- [58] K. Berkane, K. Bencheikh, Acta Phys. Pol. **B 44**, 685 (2013).
- [59] M. Julien Toulouze, Doctoral Thesis, Computer and Theoretical Chemistry, "Extension multidéterminale de la méthode de Kohn-Sham de la fonctionnelle de la densité par décomposition de l'interaction électronique en contribution de longue portée et de courte portée" (2005).
- [60] C. Weisbuch, B. Vinter, Quantum Semiconductor Heterostructures, Academic Press, New York (1993).
- [61] F. Lackner, I. Brezinova, T. Sato, K. Isikawa, and J. Burgdörfer, Phys. Rev. **A 91**, 023412 (2015).
- [62] K. Berkane, Thèse de Doctorat, Université Sétif1 (2008).
- [63] M. Brack, C. Guet, H.-B. Hakansson, Phys. Rep. **123**, 275 (1985).
- [64] Y. Lallouet, Doctoral Thesis, Claud Berand lyon-1 University (2006).
- [65] P. Ring and P. Schuck, the nuclear many body problem, 369p (Springer New York,1980).
- [66] J. Bartel, K. Bencheikh, J. Meyer, Phys. Rev. **C 77**, 024311 (2008).
- [67] T. Lesinski, M. Bender, K. Bennaceur, T. Duguet, and J. Meyer, Phys. Rev. **C 76**, 014312 (2007).
- [68] J. Bartel, K. Bencheikh, J. Meyer, Eu. Phys. J. **A 14**, 179-190 (2002).
- [69] Go. Do Dang, A. A. Raduta, Phys. Letters, **41** (1980).
- [70] D. Vautherin and D. M. Brink, Phys. Rev. **C 5**, 626 (1972).
- [71] M. Beiner, H. Flocard, N. Van Giai, P. Quentin. Nucl. Phys. **A 238** 1, 29-69 (1975).
- [72] T. H. R. Skyrme, Phil. Mag. 1, 1043 (1956) ; Nucl. Phys. 615 (1959).
- [73] H. Krivine, J. Treiner and O. Bohigas, Nuc. Phys. **A 336**, 155 (1980).
- [74] J. Bartel, P Quentin, M. Brack, C. Guet, HB. Håkansson. Nuclear Physics **A 386** 1, 79-100 (1982).

-
- [75] F. Tondeur, Phys. Letters. **123B**, **139** (1983).
- [76] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, R. Schaeffer. Nucl. Phys. **A 627**, 710-746 (1997).
- [77] T. Lesinski, M. Bender, K. Bennaceur, T. Duguet, and J. Meyer, Phys. Rev. **C 76**, 014312(2007).
- [78] J. Bartel, K. Bencheikh, and J. Meyer Phys. Rev. **C 77**, 024311 (2008).

Résumé

Ce travail est consacré à l'étude des systèmes de fermions en appliquant la méthode semi classique dans deux domaines, le premier domaine est concernant les systèmes réduite où nous avons pu dans cette partie de trouver une formule générale de la matrice densité réduite à d dimensions avec une masse constante jusqu'à l'ordre $\hbar^2$. Pour le cas particulier $d = 1$, nous avons établi une expression analytique de la matrice densité dans une distribution de masse variable. Comme une application intéressante, nous avons également dérivé au même cas une expression analytique du propagateur avec une masse variable et un potentiel quelconque, confirmé par des testes comparatives. Quelques résultats numériques sont présentés. Dans la deuxième partie nous avons vu l'effet du terme tenseur sur une fonctionnelle nucléaire de type Skyrme par calculer les densités du courants de spin pour les neutrons et les protons sous le cadre de la méthode semi classique, enfin nous avons programmé les résultats trouvé et les présenter numériquement.

Abstract

This work is devoted to the study of fermions systems by applying the semi-classical method in two fields; the first field is concerning reduced systems where we were able in this part to find a general formula from the reduce density matrix to d dimensions with a constant mass up to order $\hbar^2$. Considering a special situation we have thus established an analytical expression of the density matrix at $d=1$ in a variable mass distribution. As an interesting application we have also derived an analytical expression of the propagator with variable mass and any potential, confirmed by comparative tests. Some numerical results are presented. In the second part we have seen the effect of the tensor term on a Skyrme nuclear functional by calculating the densities of the spin-currents for neutrons and protons under the semi-classical method, finally we programmed the results found and presented them numerically.

ملخص

هذا العمل موجه لدراسة جمل فرميونات من خلال تطبيق الطريقة النصف الكلاسيكية في مجالين، يتمحور المجال الأول حول الأنظمة المقلصة حيث تمكنا في هذا الجزء من استخراج صيغة عامة لمصفوفة كثافة لفضاء بعده d مع كتلة ثابتة إلى غاية الدرجة $\hbar^2$. من اجل الحالة الخاصة $d=1$ ، قمنا بإنشاء العبارة التحليلية لمصفوفة كثافة مع الأخذ بعين الاعتبار التغير في الكتلة بدلالة الموضع. كتطبيق مثير للاهتمام أنجزنا أيضا لنفس الحالة تعبيراً تحليلياً عن المنتشر مع كتلة متغيرة و احتمال كفي و قدمنا بعض النتائج العددية. في الجزء الثاني درسنا تأثير مصطلح الموتر على وظيفة نووية من نوع سكورم من خلال حساب الكثافة الدورانية للنيوترونات والبروتونات في إطار الطريقة النصف الكلاسيكية، وفي النهاية قمنا ببرمجة النتائج التي عثرنا عليها وعرضناها عددياً.

