Nº d'ordre: 1067

50376 1983

## **THÈSE**

50376 1983

présentée à

## L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

pour l'obtention du titre de

### **DOCTEUR DE TROISIEME CYCLE**

par

Azzouz ZINOUN

## **EMPLOI DES ALGEBRES GRADUEES POUR** L'UNIFICATION DE LA THEORIE DES PARTICULES COMPOSEES ET CELLE DES **PARTICULES LIBRES**



Soutenue le 5 Juillet 1983 devant la Commission d'Examen

Membres du Jury: M. J. TILLIEU

Président

M. J. CORTOIS

Rapporteur

M. R. WERTHEIMER

Examinateur

M. R. GERGONDEY

Examinateur

M. A. VAN GROENDAEL Examinateur

Je remercie vivement Monsieur le Professeur J. CORTOIS de m'avoir fait bénéficier de son aide et de la rigueur de ses conseils durant la réalisation de ce travail ; qu'il veuille bien accepter l'expression de ma reconnaissance et de ma profonde gratitude.

J'exprime aussi mes plus vifs remerciements à Monsieur le Professeur J. TILLIEU qui me fait l'honneur de présider le jury.

Je remercie également Monsieur le Professeur R. WERTHEIMER, Monsieur R. GERGONDEY et Monsieur Van GROENENDAEL qui ont accepté de faire partie de ce jury.

Tous mes remerciements s'adressent aussi à toute l'équipe du laboratoire, qui par son amitié et sa collaboration spontanée, m'a aidé à réaliser ce travail.

Je n'oublie pas non plus Madame DUPONT Brigitte, qui a mené à bien la dactylographie de cette thèse avec beaucoup de patience.

#### SOMMAIRE

- I) Introduction
- II) Algèbre graduée d'un système de particules composées et libres en seconde quantification.
  - a) Définition d'une algèbre graduée
  - b) Choix et construction de l'algèbre
  - c) Interprétation de certaines relations de l'algèbre.
- III) Transformation unitaire laissant l'espace des états de la paire proton électron invariant.
- IV) Hamiltonien transformé:
  - 1) Transformés des opérateurs de champ des particules constituantes (protons et électrons).
  - 2) Noyau des états liés et noyau des états non liés.
  - 3) Calcul de l'hamiltonien transformé.
  - 4) Interprétation des différents termes de l'hamiltonien transformé.
- V) Conclusion.
- VI) Annexes.

## CHAPITRE I

INTRODUCTION

#### I - INTRODUCTION.

Les systèmes d'atomes, molécules, noyaux, ions, etc... sont formés d'agrégats de particules que l'on peut considérer comme des systèmes de particules composées. Les plasmas quant à eux sont formés de particules composées et de particules libres.

Les diverses méthodes utilisées pour étudier les interactions entre ces particules, méthode de perturbation, méthode de Hartree-Fock, ne les décrivent que d'une manière approchée.

L'utilisation du formalisme de seconde quantification avec une représentation appropriée nécessitent de mettre en évidence l'existence de champ de particules composées, pour que les variables dynamiques caractérisant ces particules apparaissent de manière explicite dans les résultats et permettent donc d'inclure toutes les interactions entre ces particules tels que les processus, de diffusion atome-atome, atome-proton et atome-électron; d'ionisation et de recombinaison etc...

Une première approche a été mise en oeuvre par GIRARDEAU [1][2] pour l'étude du plasma d'hydrogène partiellement ionisé, dans laquelle il considère les particules composées comme des particules élémentaires c'est à dire leurs opérateurs de champ satisfont aux relations de commutation ou d'anticommutation habituelles (Bose ou Fermi). D'autres auteurs ont axé leurs travaux sur cette approche Brittin et Stolt [3], Sakakura [4], Nishigori [5] et Gilbert [6].

Une autre approche utilise les méthodes des fonctions de Green Sahlin et Schwartz [7], Goldberg et Puff [8]. Le lien entre les deux approches n'est pas encore établi et ne semble pas évident. Nous nous sommes inspirés de la méthode de Girardeau dont nous donnerons l'essentiel ci-dessous.

Girardeau considère un plasma d'hydrogène partiellement ionisé avec des opérateurs de champ des atomes qui satisfont aux relations de commutation ou d'anticommutation (Bose ou Fermi) (cas idéal). Il définit l'espace physique où les opérateurs de champ des atomes ne satisfont pas aux relations de commutation ou d'anticommutation et l'espace idéal ou les atomes se comportent comme des vrais bosons ou des vrais fermions.

Dans l'espace idéal les opérateurs de champ des atomes sont :

 $a_{\alpha}^{+}$  = opérateur créateur d'un atome dans l'état  $\alpha$ 

 $a_{\alpha}$  = opérateur annihilateur d'un atome dans l'état  $\alpha$ 

on a les relations

$$[a_{\alpha}, a_{\alpha}^{\dagger}] = \delta_{\alpha\beta}, \quad [a_{\alpha}, a_{\beta}] = [a_{\alpha}^{\dagger}, a_{\beta}^{\dagger}] = 0$$

Dans l'espace physique les opérateurs de champ des atomes sont :

 $A_{\alpha}^{+} = \int dX dx \, \phi_{\alpha} (Xx) \, \psi^{+}(X) \, \psi^{+}(x) = opérateur créateur d'un$  atome dans l'état  $\alpha$ 

ou  $\phi_{\alpha}(Xx)$  = function d'onde de l'atome d'hydrogène.

 $\psi^{+}(X)$  = opérateur de champ de proton

 $\psi^{+}(x)$  = opérateur de champ de l'électron

X = position et le spin du proton

x = position et le spin de l'électron

 $A = (A^+)^+ = opérateur$  annihilateur de l'atome dans l'état  $\alpha$ .

on a les relations :

$$[A_{\alpha}, A_{\beta}^{+}] = \delta_{\alpha\beta} + C_{\alpha\beta}$$
,  $[A_{\alpha}, A_{\beta}] = [A_{\alpha}^{+}, A_{\beta}^{+}] = 0$ 

où  $C_{\alpha\beta}$  désigne un opérateur qui exprime l'échange entre les atomes  $\alpha$  et  $\beta$ , donc la nature composée des atomes.

$$\{ \psi(X), \psi^{+}(X^{\dagger}) \} = \delta(X-X^{\dagger}), \{ \psi(X), \psi(X^{\dagger}) \} = \{ \psi^{+}(X), \psi^{+}(X^{\dagger}) \} = 0$$

$$\{ \psi(\mathbf{x}), \psi^{+}(\mathbf{x}^{\dagger}) \} = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\dagger}), \{ \psi(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{x}^{\dagger}) \} = \{ \psi^{+}(\mathbf{x}), \psi^{+}(\mathbf{x}^{\dagger}) \} = 0$$

$$\{ \psi(X), \psi(\mathbf{x}) \} = \{ \psi^{+}(X), \psi^{+}(\mathbf{x}) \} = \{ \psi(\mathbf{x}), \psi^{+}(\mathbf{x}) \} = \{ \psi^{+}(X), \psi(\mathbf{x}) \} = 0$$

Girardeau a choisi arbitrairement de prendre l'anticommutateur entre les opérateurs de champ du proton et les opérateurs de champ de l'électron sans justification, (il aurait pu prendre le commutateur) ce qui implique le commutateur entre les opérateurs de champ des atomes. (Dans notre méthode on va justifier le choix de l'anticommutateur grace au formalisme des algèbres graduées).

Entre l'espace physique et l'espace idéal, Girardeau considère une transformation unitaire qui permet le passage de l'espace physique dans l'espace idéal.

La transformation est définie par  $u(\varepsilon) = \exp(\varepsilon F)$ 

avec 
$$F = \sum_{\alpha} (a_{\alpha}^{+} A_{\alpha} - A_{\alpha}^{+} a_{\alpha}), \quad \varepsilon = \text{nombre r\'eel.}$$

Après calcul des transformées des opérateurs de champ de l'électron et du proton, il déduit le transformé de l'hamiltonien standard H:

$$H = \int dx \ \psi^{+}(X) \ T(X) \ \psi(X) + \int dx \ \psi^{+}(x) \ T(x) \ \psi(x) + \frac{1}{2} \int dX \ dX' \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(X')$$

$$V(XX') \ \psi(X') \ \psi(X) + \frac{1}{2} \int dx \ dx' \ \psi^{+}(x) \ \psi^{+}(x') \ V(xx') \ \psi(x') \ \psi(x) + \int dX \ dx \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x) \ V(Xx) \ \psi(X) \ \psi(X) = T_{p} + T_{e} + V_{pp} + V_{ee} + V_{pe}$$

L'Hamiltonien transformé H' s'écrit :

$$H' \approx U^{-1} HU$$

où les différents termes ci-dessus sont explicités dans [1].

Notre méthode est différente de celle de Girardeau et des autres méthodes mentionnées ci-dessus ; en effet on utilise un formalisme mathématique qui paraît être un outil très intéressant en physique, c'est le formalisme des algèbres graduées qui nous permet de mettre en évidence toutes les relations de commutations ou d'anticommutation qui caractérisent le système.

On considère l'espace S espace des états de Schrödinger. C'est l'espace des combinaisons linéaires des états produit de protons et des électrons  $\psi^+(X_1) = -\psi^+(X_n) - \psi^+(x_1) = -\psi^+(x_1) = 0$  (n et  $\ell$  étant arbitraires).

Soient :  $S_1$  = espace des états produit de protons  $S_2$  = espace des états produit d'électrons.

$$S = S_1 \otimes S_2$$

Soit A l'espace des états produit d'atomes : c'est l'espace des combinaisons linéaires  $A^+_{\alpha}$  ---  $A^+_{\alpha}$  | o > ; il est clair que A C S

On considère un homomorphisme F:S+S qui laisse l'espace des particules composées invariant (FA=A), l'opérateur F est hermitique, on a alors  $S=Ker\ F$   $\bigoplus$   $Im\ F$ ; à partir de F on construit une transformation unitaire T:S+S qui laisse l'espace A invariant; le fait d'avoir A invariant permet de garder le caractère composé des particules qui le définissent, donc d'avoir les opérateurs créateurs et annihilateurs des atomes. Comme variables dynamiques du système.

## CHAPITRE II

ALGÈBRE GRADUÉE DES OPÉRATEURS D'UN SYSTÈME

DE PARTICULES COMPOSÉES ET LIBRES

# II - ALGÈBRE GRADUÉE DES OPÉRATEURS D'UN SYSTÈME DE PARTICULES COMPOSÉES ET LIBRES : [9], [10], [11].

#### a) DEFINITION D'UNE ALGEBRE GRADUEE.

Une algèbre L est dite graduée si  $L = \bigoplus_{i=0}^{\infty} L_i$  où  $L_i$  est un sous espace de L, et si on se donne une forme bilinéaire notée [ , ]<sub>4</sub> de L × L + L telle que les trois conditions suivantes soient satisfaites.

\* 
$$[L_{k}, L_{k}]_{g} \subseteq L_{k+k}$$
  $k = \text{degr\'e de } L_{k}$ 

\*  $[x,y]_{g} = -(-1)^{kk} [y,x]_{g}$   $x \in L_{k}$ ,  $y \in L_{k}$  (1)

\*  $[x, [y,z]_{g}]_{g} = [[x,y]_{g}, z]_{g} + (-1)^{kk} [y, [x,z]_{g}]_{g}$ 

Une algèbre graduée contient les commutateurs et les anticommutateurs, que nous noterons respectivement [,] et {,}

Soit :  $A_p$  et  $B_p$  les générateurs de l'algèbre graduée L.

On a :

$$[A_{\mathbf{m}}, A_{\mathbf{n}}] = C_{\mathbf{mn}}^{\mathbf{P}} A_{\mathbf{p}}$$

$$[A_{\mathbf{m}}, B_{\alpha}] = F_{\mathbf{m}\alpha}^{\beta} B_{\beta}$$

$$\{B_{\alpha}, B_{\beta}\} = D_{\alpha\beta}^{\mathbf{m}} A_{\mathbf{m}}$$
(2)

Les générateurs pairs  $(A_m)$  forment une algèbre de Lie c'est le sous-espace pair  $\mathcal G.$ 

Les générateurs impairs  $(B_\alpha)$  forment le sous-espace impair U L =  $\mathcal{G} \ \theta \ U$ 

Jacobi:

$$[A_{\mathbf{m}}, \{B_{\alpha}, B_{\beta}\}] + \{ [B_{\alpha}, A_{\mathbf{m}}], B_{\beta}\} + \{ [B_{\beta}, A_{\mathbf{m}}], B_{\alpha}\} = 0$$

$$[B_{\alpha}, \{B_{\beta}, B_{\gamma}\}] + [B_{\gamma}, \{B_{\alpha}, B_{\beta}\}] + [B_{\beta}, \{B_{\gamma}, B_{\alpha}\}] = 0$$
(3)

on peut définir la forme de Killing à l'aide de la représentation adjointe :

$$g_{mn} = C_{mq}^{P} C_{nq}^{q} - F_{m\alpha}^{\beta} F_{n\beta}^{\alpha}$$

$$g_{\alpha\beta} = -g_{\beta\alpha} = F_{m\alpha}^{\gamma} A_{\beta\gamma}^{m} - F_{m\beta}^{\gamma} A_{\alpha\gamma}^{m}$$

$$g_{m\alpha} = g_{\alpha m} = 0$$
(4)

#### b) CHOIX ET CONSTRUCTION DE L'ALGEBRE

On considère un plasma d'hydrogène partiellement ionisé :

- Soit  $|\phi_a\rangle$  un état d'un proton et d'un électron  $|\phi_a\rangle = \int dX dx \phi_a(Xx) \psi^+(X) \psi^+(x) |0\rangle = A_a^+ |0\rangle$  (5)

 $_a^{\phi}$  (Xx) étant la fonction d'onde du proton et de l'électron, l'ensemble des  $_a^{\phi}$  est orthonormé et complet.

- Soit  $|\phi_{\alpha}\rangle$  un état d'un atome (état lié)  $|\phi_{\alpha}\rangle = \int dX \ dx \ \phi_{\alpha}(Xx) \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x) \ | \ 0 \rangle = A_{\alpha}^{+} \ | \ 0 \rangle$  (6)  $\alpha = \text{différents nombres quantiques de l'atome}$   $\{\phi_{\alpha}(Xx)\}$  est un ensemble orthonormé mais incomplet.

- Soit  $|\phi_m\rangle$  un état non lié d'un proton et d'un électron.

$$|\phi_{\mathbf{m}}\rangle = \int d\mathbf{X} d\mathbf{x} \quad \phi_{\mathbf{m}}(\mathbf{X}\mathbf{x}) \quad \psi^{+}(\mathbf{X}) \quad \psi^{+}(\mathbf{x}) \quad | \quad 0 \quad \rangle \tag{7}$$

 $\{\phi_m(Xx)\}\$  est un ensemble orthonormé mais incomplet.

(pour les  $\phi_m(Xx)$ , orthonormé c'est à dire  $\int dm \ dn \ \phi_m^*(Xx) \ \phi_n(Xx) = \delta(m-n)$  et non  $\delta_{mn}$ , on emploiera le signe  $\Sigma$  au lieu de l'intégrale pour conserver l'homogénéité des écritures).

on a 
$$\phi_a(Xx) = \sum_{\alpha} C_{\alpha,a} \phi_{\alpha}(Xx) + \sum_{m} C_{m,a} \phi_{m}(Xx)$$
 (8)

les  $C_{\alpha,a}$ ,  $C_{m,a}$  étant de coefficients de normalisation, le fait d'introduire les  $\phi_a(Xx)$  permet d'avoir les états liés et le continuum.

Les lettres a, b, c, d, e, f désignent les mélanges des états liés et des états non liés.

Les lettres grecques désignent les atomes (états liés)

Les lettres k, l, m, n, o, p, q, ... désignent les états non liés.

Soient:

a<sub>i</sub><sup>+</sup>, a<sub>i</sub> les opérateurs créateurs et annihilateurs de l'électron.

 $a_{i}^{\dagger}$ ,  $a_{i}^{\dagger}$  les opérateurs créateurs et annihilateurs du proton.

 $A_a^{\dagger}$ ,  $A_a^{\phantom{\dagger}}$  les opérateurs créateurs et annihilateurs d'un état du proton et de l'électron.

$$A_{\mathbf{a}}^{+} = \int d\mathbf{X} \ d\mathbf{x} \ \phi_{\mathbf{a}}(\mathbf{X}\mathbf{x}) \ \psi^{+}(\mathbf{X}) \ \psi^{+}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}} \int d\mathbf{X} \ d\mathbf{x} \ \phi_{\mathbf{a}}(\mathbf{X}\mathbf{x}) \ \phi_{\mathbf{j}}^{*}(\mathbf{X})$$
$$\phi_{\mathbf{i}}^{*}(\mathbf{x}) \times a_{\mathbf{i}}^{+} a_{\mathbf{i}}^{+} \tag{9}$$

 $\phi_{\mathbf{i}}(X)$  = fonction d'onde du proton

 $\phi_i(x)$  = fonction d'onde de l'électron.

On définit les opérateurs "paires de fermions" suivants :

type électrons :

$$a_{i_{i\neq i}}^{+}, a_{i_{i}}^{+} = E_{i_{i}}^{i_{i}}, \quad a_{i_{i\neq i}}, a_{i} = E_{i_{i}}, a_{i}^{+}, a_{i}^{+} = E_{i_{i}}^{i_{i}}$$

type protons :

<sub>= E</sub>j

(10)

$$E^{jj'} = a^{+}_{j\neq j}, a^{+}_{j'}, E_{j'j} = a_{j,j'\neq j}, a^{+}_{j}, a^{+}_{j'}, a^{-}_{j'} = E^{j}_{j'}$$

type noyau-électron :

$$a_j^{\dagger} a_i, a_i^{\dagger} a_j$$

l'opérateur  $a_j^+ a_i^+$  et  $a_i^- a_j^-$  rentrent dans la définition de  $A_a^+$  et  $A_a^-$ .

On suppose que le vide est commun aux différents espaces ; l'espace des électrons, l'espace des protons et l'espace produit tensorien des deux.

L'opérateur  $a_{j}^{+}a_{i}$  agissant sur |i> donne |j> .  $(a_{j}^{+}a_{i}|i>=a_{j}^{+}|o>=|j>), \text{ donc } a_{j}^{+}a_{i} \text{ permet de passer de l'espace des électrons à celui des protons. } (a_{i}^{+}a_{j}^{-}|j>=a_{i}^{+}|o>=|i>).$ 

- Un système contenant n noyaux et ln électrons, a pour fonction d'onde  $\psi(X_1 \ldots X_n, x_1 \ldots x_{ln})$ ; on peut toujours décomposer cette fonction sur la base des états d'un noyau et l électrons.

 $\{ \ \phi_{\alpha_1}(X_1,x_1 \ \ldots \ x_{\ell}) \ \ldots \ \phi_{\alpha_n}(X_n, \ x_{\ell n-\ +1} \ \ldots \ x_{\ell n}) \ \} \ ; \ \text{les} \quad \phi_{\alpha_1} \quad \text{peuvent}$  représenter des états liés (atomes) ou des états non liés (continuum).  $\text{L'ensemble des} \quad \phi_{\alpha_1} \quad \text{est orthonormé et complet.}$ 

$$\psi(X_1 \ldots X_n, x_1 \ldots x_n) = \sum_{\alpha_1 \ldots \alpha_n} C(\alpha_1 \ldots \alpha_n) \phi_{\alpha_1 \ldots \alpha_n}$$
(11)

on montre (11) que les fonctions  $C(\alpha_1 \ldots \alpha_n)$  sont symétriques ou antisymétriques en  $\alpha_i$  selon que  $2J+\ell$  est pair ou impair. (ou J= spin nucléaire,  $\ell=$  nombre d'électrons dans  $\alpha_i$ ) ce qui revient à permuterles noyaux et les électrons entre les atomes. Les  $C(\alpha_1 \ldots \alpha_n)$  peuvent être regardées comme des nouvelles fonctions d'onde qui représenteront le système.

Donc quand 2J + l est pair on a un "boson" 2J + l est impair on a un "Fermion"

On va réunir toutes les particules dont  $2J+\ell$  est pair dans un sous espace qu'on notera  $L_0$ , et les particules dont  $2J+\ell$  est impair dans un sous espace qu'on notera  $L_1$ ; l'espace total sera :

 $L = L_0 \oplus L_1$ , notre algèbre sera donc  $Z_2$  - graduée  $L_0$  sera le sous-espace pair de degré 0 (pair)  $L_1$  sera le sous-espace impair de degré 1 (impair)

Revenons dans le cas qui nous intéresse, un plasme d'hydrogène partiellement ionisé :

pour un proton:  $J=\frac{1}{2}$ ,  $\ell=o\Rightarrow 2J+\ell=1\in L_1$ pour un électron: J=0,  $\ell=1\Rightarrow 2J+\ell=1\in L_1$ pour un atome:  $J=\frac{1}{2}$ ,  $\ell=1\Rightarrow 2J+\ell=2\in L_0$ 

puisque 2 appartient à la même classe que  $\,0\,$  ce sont les éléments de  $\,Z_2\,$ 

pour une paire d'électron; J=o,  $\ell=2$  =>2 $J+\ell=2$   $\in$   $L_o$  pour une paire de proton ;  $J=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}=1$ ,  $\ell\Rightarrow o$  >2 $J+\ell=2$   $\in$   $L_o$ 

Comme c'est le degré qui intervient dans la définition du crochet (commutateur ou anticommutateur) on va donc avoir :

entre deux éléments de  $L_0$  le commutateur, entre deux éléments de  $L_1$  l'anticommutateur, entre un élément de  $L_0$  et un élément de  $L_1$  c'est le commutateur.

Le choix de l'anticommutateur entre proton et électron est donc ici imposé par la théorie.

D'où les diverses relations qui caractérisent l'algèbre

$$\{a_{i}, a_{i}^{+}\} = \delta_{ii}, \quad \{a_{i}, a_{i}^{-}\} = \{a_{i}^{+}, a_{i}^{+}\} = 0$$
 i désigne les nombres quantiques de l'e et j ceux du noyau.

$$\{a_{i}, a_{j}^{+}\} = \{a_{i}, a_{j}\} = \{a_{i}^{+}, a_{j}^{+}\} = \{a_{i}^{+}, a_{j}\} = 0$$

$$[A_{a}, A_{b}^{+}] = \delta_{ab} - \sum_{jj'} \int dX' dX dx \phi_{a}^{*}(X'x) \phi_{b}(Xx) \phi_{j'}^{*}(X) \phi_{j'}(X') a_{j}^{+} a_{j'}^{-} a_{j'}^{-} A_{b'}^{-} A_{b'}^{-$$

$$[A_{\mathbf{a}}^{+}, a_{\mathbf{j}}^{+}, a_{\mathbf{j}}^{+}] = 0$$

$$[A_{\mathbf{a}}^{+}, a_{\mathbf{j}}^{+}, a_{\mathbf{j}}^{+}] = -\sum_{\mathbf{i}\mathbf{j}} \int dX \ dx \ \phi_{\mathbf{a}}(Xx) \ \phi_{\mathbf{j}}^{*}(X) \ \phi_{\mathbf{i}}^{*}(x) \ a_{\mathbf{i}}^{+} \ a_{\mathbf{j}}^{+} \ \delta_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{+}$$

$$+ \sum_{\mathbf{i}\mathbf{j}} \int dX \ dx \ \phi_{\mathbf{a}}(Xx) \ \phi_{\mathbf{j}}^{*}(X) \ \phi_{\mathbf{i}}^{*}(x) \ a_{\mathbf{i}}^{+} \ a_{\mathbf{j}}^{+} \ \delta_{\mathbf{j}}^{+} \mathbf{j}^{+}$$

$$[A_{a}^{+}, a_{j}^{+}, a_{j}^{+}] = -\sum_{i,j} \int dX dx \phi_{a}(Xx) \phi_{j}^{*}(X) \phi_{i}^{*}(x) a_{j}^{+} a_{i}^{+} \delta_{j,j}^{+}$$

$$[A_{a}^{+}, a_{j}^{+}, a_{i}^{+}, ] = \sum_{i,j} \int dX dx \phi_{a}(Xx) \phi_{j}^{*}(X) \phi_{i}^{*}(x) a_{j}^{+}, a_{j}^{+} \delta_{ii}^{-}$$

$$[A_{a}^{+}, a_{i}^{+}, a_{j}^{+}] = \sum_{i,j} \int dX dx \phi_{a}(Xx) \phi_{j}^{*}(X) \phi_{i}^{*}(x) a_{i}^{+} a_{i}^{+}, \delta_{jj}^{+}$$

$$[A_a^+, a_1^+,] = 0$$

$$[A_a^+, a_{i}^+] = 0$$

$$[A_{a}^{+}, a_{j}^{-}] = -\sum_{i,j} \int dX dx \phi_{a}(Xx) \phi_{j}^{*}(X) \phi_{i}^{*}(x) a_{i}^{+} \delta_{jj},$$

$$[A_a^+, a_{i}^-] = \sum_{i,j} \int dX dx \phi_a(Xx) \phi_j^*(X) \phi_i^*(x) a_j^+ \delta_{ii}^-$$

s'ajoutent à ces relations leurs conjugées hermitiques.

Pour les paires de fermions

$$[E_{j}^{i}, E_{j}^{i'}] = \delta_{i'j} E_{j}^{i}, - \delta_{ij}, E_{j}^{i'}$$

$$[E_{j}^{i}, E_{i'j'}] = \delta_{ij}, E_{ji'} - \delta_{ii'}, E_{jj'}$$

$$[E^{ij} E_{i'j}, ] = \delta_{ij}, E^{j}_{i}, + \delta_{ji}, E^{i}_{j}, - \delta_{ii}, E^{j}_{j}, - \delta_{jj}, E^{i}_{i},$$

$$[E_{i,j}, E_{i',j'}] = 0$$

$$[a_i, E_j^{i'}] = \delta_{ii}, a_j$$

$$[a_i, E_{i'j}] = 0$$

dans ces relations j désigne un électron ou un proton.

$$[a_{i}, E^{i'j'}] = \delta_{ii}, a_{j}^{+}, -\delta_{ij} a_{i}^{+},$$

s'ajoutent à ces relations leurs conjuguées hermitiques.

Dans les relations suivantes i désigne un électron et j un proton.

$$[E_{i}^{i}, a_{j}^{\dagger} a_{i}^{"}] = -a_{j}^{\dagger} a_{i}, \delta_{i}^{"} i^{"}$$

$$[E_{i}^{i}, a_{i}^{+}, a_{i}] = a_{i}^{+} a_{i} \delta_{i'i''}$$

$$[E^{ii'}, a^+_j a^+_{i''}] = -a^+_j a^+_i, \delta_{i''i} + a^+_j a^-_i \delta_{i''i'}$$

$$[E^{ii'}, a_{i''}^+ a_{i}] = 0$$

$$[E_{ii}, a_i^+ a_{i'}] = 0$$

$$[E_{ii}^{r}, a_{i}^{+}, a_{j}^{-}] = a_{i} a_{j} \delta_{i'i''} - a_{i'} a_{j} \delta_{ii''}$$

$$[a_{i}^{+}, a_{j}^{+} a_{i}^{+}] = -a_{j}^{+} \delta_{ii}^{-}$$

$$[a_{i}^{+}, a_{i}^{+} a_{j}] = 0$$

$$[a_{j}^{+}, a_{j}^{+} a_{i}] = 0$$

$$[a_{j}^{+}, a_{i}^{+} a_{j}^{-}] = -a_{i}^{+} \delta_{jj}$$

s'ajoutent à ces relations leurs conjuguées hermitiques.

## C) <u>INTERPRETATION DE CERTAINES RELATIONS DE COMMUTATION</u> DE L'ALGEBRE.

A l'aide de la représentation adjointe on peut définir les opérateurs créateurs et annihilateurs d'un atome ionisé, en effet, la relation :

$$[a_{\mathbf{i}}, A_{\alpha}^{+}] = -\sum_{\mathbf{i}\mathbf{j}} \int dX \ dx \quad \phi_{\alpha}(Xx) \quad \phi_{\mathbf{j}}^{*}(X) \quad \phi_{\mathbf{i}}^{*}(x) \quad a_{\mathbf{j}}^{+} \quad \delta_{\mathbf{i}\mathbf{i}},$$
peut être écrite :
$$[a_{\mathbf{i}}, A_{\mathbf{d}}^{+}] = -\sum_{\mathbf{j}} \int dX \ dx \quad \phi_{\alpha}(Xx) \quad \phi_{\mathbf{j}}^{*}(X) \quad \phi_{\mathbf{i}}^{*}(x) \quad a_{\mathbf{j}}^{+} = ad(a_{\mathbf{i}}) \quad A_{\alpha}^{+}$$

$$(13)$$

cette relation est équivalente, en utilisant les opérateurs de champ à

$$[\psi(\mathbf{x}), A_{\alpha}^{\dagger}] = -\int d\mathbf{X} \, \phi_{\alpha}(\mathbf{X}\mathbf{x}) \, \psi^{\dagger}(\mathbf{X}) = \mathrm{ad}(\psi(\mathbf{x})) \, A_{\alpha}^{\dagger}$$
 (14)

on voit très bien que l'atome  $\alpha$  a perdu un électron ; sur un atome d'hydrogène, cela est moins visible puisque le processus de dissociation de l'atome est le même que celui de l'ionisation, le phénomène apparaît nettement pour des atomes dont le cortège électronique est supérieur à un.

#### - Dans la relation

- où

$$[A_{\alpha}, A_{\beta}^{+}] = \delta_{\alpha\beta} + C_{\alpha\beta}$$

 $C_{\alpha\beta} = -\int dX dX' dx \phi_{\alpha}^{*}(X'x) \phi_{\beta}(Xx) \psi^{+}(X) \psi(X') - \int dX dx' dx'$ 

$$\phi_{\alpha}^{*}(Xx^{\dagger}) \phi_{\beta}(Xx) \psi^{+}(x) \psi(x^{\dagger})$$

La présence de l'opérateur  $C_{\alpha\beta}$  est une manifestation cinématique de la nature composée des atomes d'hydrogène, il exprime l'échange des électrons et des protons entre les atomes  $\alpha$  et  $\beta$ , cet opérateur est différent de zéro en général, il tend vers zéro quand

les domaines des fonctions d'onde des atomes  $\alpha$  et  $\beta$  ne se recouvrent pas, ce qui signifie que les atomes peuvent être considérés comme des vrais bosons, la relation  $[A_{\alpha}, A_{\beta}^{+}]$  se réduit à  $\delta_{\alpha\beta}$ . Si  $\alpha = \beta$ ,  $C_{\alpha\alpha}$  représente les effets d'échange entre fonctions d'onde qui se recouvrent totalement (Strongly overlapping atomic wave functions).

### CHAPITRE III

TRANSFORMATION UNITAIRE LAISSANT L'ESPACE DES ÉTATS
DES PAIRES CRÉATRICES ÉLECTRON - PROTON INVARIANT

III - TRANSFORMATION UNITAIRE LAISSANT L'ESPACE DES ÉTATS DES PAIRES CRÉATRICES -ÉLECTRON - PROTON INVARIANT.

Le fait de choisir une telle transformation permet d'avoir une représentation dans laquelle les propriétés et la présence des particules liées et non liées sont explicites dans les résultats qualitatifs qu'on va obtenir, donc on aura les opérateurs de champ de ces particules comme variables dynamiques du système.

Soit F l'opérateur suivant :

$$F = \sum_{\mathbf{a}} A_{\mathbf{a}}^{+} A_{\mathbf{a}}^{-} - \frac{1}{2} \int dX \ dX^{\dagger} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(X^{\dagger}) \ \psi(X^{\dagger}) \ \psi(X) - \frac{1}{2} \int dx \ dx^{\dagger} \ \psi^{+}(x)$$

$$\psi^{+}(\mathbf{x}^{\dagger}) \ \psi(\mathbf{x}^{\dagger}) \ \psi(\mathbf{x}) = \int dX \ d\mathbf{x} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(\mathbf{x}) \ \psi(\mathbf{x}) \ \psi(X) - \frac{1}{2}$$

$$\int dX \ dX^{\dagger} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(X^{\dagger}) \ \psi(X) - \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \ d\mathbf{x}^{\dagger} \ \psi^{+}(\mathbf{x}) \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{\dagger}) \ \psi(\mathbf{x}^{\dagger}) \ \psi(\mathbf{x})$$

$$(15)$$

car 
$$\sum_{\mathbf{a}} \phi_{\mathbf{a}}^{*}(\mathbf{X}\mathbf{x}) \phi_{\mathbf{a}}(\mathbf{X}^{\dagger} \mathbf{x}^{\dagger}) = \delta(\mathbf{X}^{\dagger} - \mathbf{X}) \delta(\mathbf{x}^{\dagger} - \mathbf{x}).$$

on a choisi F sous cette forme parcequ'il permet d'avoir une certaine analogie entre la théorie des particules élémentaires et la théorie des particules composées.

En effet, soit  $\psi^+(y)$  et  $\psi(y)$  les opérateurs de champ d'un boson, l'opérateur nombre de bosons est défini par  $N=\int dy \ \psi^+(y) \ \psi(y)$ .

On a les relations de commutation suivantes :

$$[\psi(y), \psi^{+}(y^{\dagger})] = \delta(y-y^{\dagger}), [N, \psi^{+}(y)] = \psi^{+}(y), [N, \psi(y)] = -\psi(y)$$
 (16)

Pour les particules composées (ici les états d'un proton et d'un électron) on a (12) :

 $[A_a, A_b^+] = \delta_{ab} + C_{ab}, \quad C_{ab}$  est un opérateur qui exprime la nature composée de ces particules . Alors :

$$[F, A_a^+] = A_a^+ ; [F, A_a] = -A_a$$
 (17)

Dans ces relations F joue effectivement un rôle analogue à celui de N dans (16).

Quand  $C_{ab}$  tend vers zéro, les états du proton et de l'électron sont des états de bosons ce qui implique que l'opérateur nombre des états du proton et de l'électron est  $\sum_{a} A_{a}^{\dagger} A_{a}$ . On peut exprimer cet opérateur en fonction des opérateurs d'atomes et des paires électron - proton non liées.

En effet:

$$A_{\mathbf{a}}^{+} = \int d\mathbf{X} \, d\mathbf{x} \, \phi_{\mathbf{a}}(\mathbf{X}\mathbf{x}) \, \psi^{+}(\mathbf{X}) \, \psi^{+}(\mathbf{x})$$

$$\phi_{\mathbf{a}}(\mathbf{X}\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{a}} C_{\alpha,\mathbf{a}} \, \phi_{\alpha}(\mathbf{X}\mathbf{x}) + \sum_{\mathbf{m}} C_{\mathbf{m},\mathbf{a}} \, \phi_{\mathbf{m}}(\mathbf{X}\mathbf{x})$$
(18)

$$\sum_{\mathbf{a}} A_{\mathbf{a}}^{+} A_{\mathbf{a}} = \sum_{\mathbf{a},\alpha,\beta} C_{\alpha,\mathbf{a}} C_{\beta,\mathbf{a}}^{*} A_{\alpha}^{+} A_{\beta} + \sum_{\mathbf{a},\alpha,m} C_{\alpha,\mathbf{a}} C_{m,\mathbf{a}}^{*} A_{\alpha}^{+} A_{m}$$

$$+ \sum_{\mathbf{a},m,\alpha} C_{m,\mathbf{a}} C_{\alpha,\mathbf{a}}^{*} A_{m}^{+} A_{\alpha} + \sum_{\mathbf{a},m,m'} C_{m,\mathbf{a}} C_{m'}^{*}, \mathbf{a} A_{m}^{+} A_{m}$$
(19)

Or: 
$$\sum_{\mathbf{a}} C_{\alpha,\mathbf{a}} C_{\beta,\mathbf{a}}^{*} = \delta_{\alpha\beta}$$
$$\sum_{\mathbf{a}} C_{\mathbf{m},\mathbf{a}} C_{\mathbf{m}',\mathbf{a}}^{*} = \delta(\mathbf{m} - \mathbf{m}')$$

ce qui donne :

$$\sum_{\mathbf{a}} \mathbf{A}_{\mathbf{a}}^{\dagger} \mathbf{A}_{\mathbf{a}} = \sum_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha}^{\dagger} \mathbf{A}_{\alpha} + \sum_{\mathbf{m}} \mathbf{A}_{\mathbf{m}}^{\dagger} \mathbf{A}_{\mathbf{m}}$$

on pourra dire que le nombre d'atomes est  $\sum_{\alpha} A_{\alpha}^{+} A_{\alpha}$  et cela dans le cas ou  $C_{ab} = 0$  donc  $C_{a,\beta} = 0$ 

#### Remarque:

Dans le cas où  $C_{ab} = 0$  l'opérateur F est identique à  $N = \sum\limits_{a} A_a^{\dagger} A_a$ 

Calculons l'action de F sur un état d'un proton et d'un électron  $A_{\mathbf{b}}^+$   $\mid$  o >

$$F A_{b}^{+} | o > = \left( \sum_{a} A_{a}^{+} A_{a} \right) A_{b}^{+} | o > \left( \frac{1}{2} \right) dX dX' \quad \psi^{+}(X) \psi^{+}(X') \psi(X) \psi(X) \right) A_{b}^{+} | o > 0$$

$$-(\frac{1}{2}) dx dx' \psi^{+}(X) \psi^{+}(X') \psi(X') \psi(X)) A_{b}^{+} | o >$$

$$= A_b^+ \mid o > \tag{20}$$

l'espace de la paire e - p est bien invariant sous l'action de F.

L'opérateur F est hermitique  $F^+ = F$ ; à partir de F on construit une transformation unitaire qui nous donnera un résultat identique c'est à dire laisser l'espace de la paire e - p invariant.

Soit  $T = e^{i\lambda F}$   $\lambda$  un paramètre réel

$$e^{i\lambda F} A_{a}^{+} \mid o \rangle = \left(1 + \frac{i\lambda F}{1!} + \frac{(i\lambda F)^{2}}{2!} + \dots + \frac{(i\lambda F)^{n}}{n!} + \dots\right) A_{a}^{+} \mid o \rangle$$

$$= \left(1 + i\lambda + \frac{(i\lambda)^{2}}{2!} + \dots + \frac{(i\lambda)^{n}}{n!} + \dots\right) A_{a}^{+} \mid o \rangle$$

$$= e^{i\lambda} A_{a}^{+} \mid o \rangle \qquad (27)$$

or  $A_a^+|_0$  > et  $e^{i\lambda}A_a^+|_0$  > représente le même état, donc l'espace des particules liées et non liées est bien invariant sous la transformation unitaire T.

A partir des relation (17) on peut exprimer les transformées des opérateurs  $A_a^+,\ A_a^-.$ 

$$\vec{e}^{i\lambda F} A_a^+ e^{i\lambda F} = A_a^+ + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(i\lambda)^j}{j!} [A_a^+, F]_j$$

 $\left[ \begin{smallmatrix} A_a^{\dagger}, \; F \end{smallmatrix} \right]_{\dot{J}}$  désigne le commutateur à l'ordre  $\; j \; de \; A_a^{\dagger} \; et \; F.$ 

$$[A_a^+, F]_j = [...[[A_a^+, F], F] ..., F], F]$$
j fois

$$e^{-i\lambda F}$$
  $A_a^+$   $e^{i\lambda F}$  =  $e^{-i\lambda}$   $A_a^+$  (22)  
 $e^{-i\lambda F}$   $A_a$   $e^{i\lambda F}$  =  $e^{i\lambda}$   $A_a$ 

Les transformés des opérateurs créateurs et annihilateurs des états d'un proton et d'un électron s'obtiennent simplement en multipliant l'opérateur créateur par un coefficient de phase et l'opérateur annihilateur par le coefficient de phase conjugué (cas particulier d'un changement de jauge, puisque le paramètre  $\lambda$  ne dépend pas de la position).

L'opérateur hermitique F décompose S en deux sous espaces supplémentaires  $S = \text{Ker } F \oplus \text{Im } F$ 

Ker  $F = \{$  des états / F (de ces états) = 0  $\}$  , on voit facilement que Ker F est constitué des états de protons et d'électrons libres.

$$F \quad \psi^{+}(X) \mid o > = 0$$
  
 $F \quad \psi^{+}(x) \mid o > = 0$ 

Im F est formé de l'espace des états de la paire électron - proton, l'espace des états de la paire proton - proton, l'espace des états de la paire électron - électron, l'espace du triplet proton électron électron, l'espace du triplet proton proton électron et l'espace du proton électron proton électron.

On ne va considérer que les opérateurs de champ relatifs à ces états pour éliminer les collisions multiples (les autres états sont négligés).

## CHAPITRE IV

HAMILTONIEN TRANSFORMÉ

IV - HAMILTONIEN TRANSFORMÉ.

#### 1) TRANSFORMES DES OPERATIONS DE CHAMP DES PARTICULES CONSTITUANTS.

Dans la représentation de Schrödinger (représentation dans laquelle n'apparait que les opérateurs de champ des particules constituants ici protons et électrons) l'hamiltonien du système s'écrit :

$$H = T_p + T_e + V_{pp} + V_{ee} + V_{pe}$$

avec :

$$T_{p} = \int dX \ \psi^{+}(X) \ T(X) \ \psi(X)$$

$$T_{e} = \int dx \ \psi^{+}(x) \ T(x) \ \psi(x)$$

$$V_{pp} = \frac{1}{2} \int dX \ dX' \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(X') \ V(XX') \ \psi(X') \ \psi(X)$$

$$V_{ee} = \frac{1}{2} \int dx \ dx' \ \psi^{+}(x) \ \psi^{+}(x') \ V(xx') \ \psi(x)$$

$$V_{pe} = \int dX \ dx \ \psi^{+}(X) \ \psi(x) \ V(Xx) \ \psi(x) \ \psi(X)$$
(23)

puisqu'on a considéré un endomorphisme F de S  $\rightarrow$  S puis la transformation unitaire T de S  $\rightarrow$  S, on va calculer le transformé H' de H, H' = T<sup>-1</sup> HT pour cela il faut calculer les transformés des opérateurs créateurs et annihilateurs  $\psi^+(X)$ ,  $\psi(X)$ ,  $\psi^+(x)$ ,  $\psi(x)$ ; l'hamiltonien H' sera équivalent à H et contiendra les mêmes informations et dans lequel apparaîtra explicitement les opérateurs de champ des particules composées (on aura des phénomènes de dissociation, d'ionisation, de recombinaison, ...).

$$H' = T^{-1} HT = \int dx T^{-1} \psi^{+}(x) T T^{-1} T(x) T T^{-1} \psi(x) T$$

$$+ \int dX T^{-1} \psi^{+}(X) T T^{-1} T(X) T T^{-1} \psi(X) T \qquad (24)$$

$$+ \frac{1}{2} \int dX dX' T^{-1} \psi^{+}(X) T T^{-1} \psi^{+}(X') T T^{-1} V(XX') T T^{-1} \psi(X') T T^{-1} \psi(X) T$$

$$+ \frac{1}{2} \int dx dx' T^{-1} \psi^{+}(x) T T^{-1} \psi^{+}(x') T T^{-1} V(xx') T T^{-1} \psi(x') T T^{-1} \psi(x) T$$

$$+ \int dX dx T^{-1} \psi^{+}(X) T T^{-1} \psi^{+}(x) T T^{-1} V(Xx) T^{-1} \psi(x) T T^{-1} \psi(X) T$$

il faut calculer les quantités :

$$T^{-1} \psi^{+}(X) T ; T^{-1} \psi^{+}(x) T, T^{-1} \psi(X) T, T^{-1} \psi(x) T.$$

$$T^{-1} \psi^{+}(X) T = e^{-i\lambda F} \psi^{+}(X) e^{i\lambda F}$$

$$= \psi^{+}(X) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(i\lambda)^{j}}{j!} [\psi^{+}(X), F]_{j} \qquad (25)$$

où  $\left[\begin{array}{cc} \psi^+(X), F \end{array}\right]_{\mathbf{j}}$  désigne le commutateur  $\psi^+(X)$  avec F à l'ordre  $\mathbf{j}$  il est égal à  $\left[\ldots \left[\begin{array}{cc} \psi^+(X), F \right], F \right], F \right] \ldots, F \right].$ 

$$[\psi^{+}(X),F]_{1} = -\sum_{a} \int dx_{1} \phi_{a}^{*}(X x_{1}) A_{a}^{+} \psi(x_{1}) + \psi^{+}(X) \int dX_{1} \psi^{+}(X_{1}) \psi(X_{1})$$

on ne conservera dans les commutateurs que les termes qui ont au plus deux créateurs à gauche (après avoir mis les expressions sous la forme normale) et cela afin d'éliminer les collisions multiples (cf. GIRARDEAU).

$$- \sum_{\mathbf{a}} \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \quad \phi_{\mathbf{a}}^* (\mathbf{x}_{\mathbf{x}_1}) A_{\mathbf{a}}^+ \psi^+(\mathbf{x}_2) \psi(\mathbf{x}_1) \psi(\mathbf{x}_2)$$
 (26)

- 2 
$$\sum_{ab} \int dX_1 dx_1 \phi_a^* (Xx_1) A_a^+ \psi^+(X_1) \phi_b(X_1 x_1) A_b$$

$$[\ \psi^{+}(X),\ F]_{3} = -\sum_{a} \int dx_{1} \ \phi^{*}_{a}(xx_{1}) \ A^{+}_{a} \ \psi(x_{1}) \ + \ \psi^{+}(X) \int dx_{1} \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi(x_{1})$$

+ 3 
$$\sum_{a} dx_1 dx_2 \phi_a^*(xx_1) A_a^+ \psi^+(x_2) \psi(x_1) \psi(x_2)$$

$$+ \sum_{ab} \int_{a} dx_{1} dx_{2} \phi_{a}^{*} (xx_{1}) \psi_{b}^{*} (x_{1}, x_{2}) A_{a}^{+} A_{b}^{+} \psi(x_{1}) \psi(x_{2})$$

on déduit par recurrence: (démonstration en annexe)

$$[\psi^{+}(X), F] = \sum_{2} \int dx_{1} \phi_{a}^{*}(Xx_{1}) A_{a}^{+} \psi(x_{1})$$

+ 
$$(1 - 2^{2p-1})$$
  $\sum_{a} \int dx_1 dx_2 \phi_a^*(xx_1) A_a^+ \psi^+(x_2) \psi(x_1) \psi(x_2)$  (2

$$+2\sum_{ab} dx dx_1 \phi_a^* (xx_1) A_a^+ \psi^+(x_1) A_b \phi_b (x_1 x_1)$$

+ 
$$\left[ \left( \frac{13}{3} - 2p \right) 2^{2p-2} - \frac{7}{3} \right] \left[ \int dx_1 dx_1 dx_2 \phi_a^*(xx_1) \phi_b^*(x_1 x_2) \right]$$

 $A_{\mathbf{a}}^{+} A_{\mathbf{b}}^{+} \psi(\mathbf{x}_{2}) A_{\mathbf{c}} \phi_{\mathbf{c}}(X_{1} \mathbf{x}_{1})$ 

+ 
$$\psi^{+}(x) \int dx_{1} \psi^{+}(x_{1}) \psi(x_{1})$$

et:

$$[\psi^{+}(X), F]_{2p+1} = -\sum_{a} \int dx_{1} \phi_{a}^{*}(Xx_{1}) A_{a}^{+} \psi(x_{1})$$

$$+ (2^{2p} - 1) \sum_{a} \int dx_{1} dx_{2} \phi_{a}^{*}(Xx_{1} A_{a}^{+} \psi^{+}(x_{2}) \psi(x_{1}) \psi(x_{2})$$

$$+ \psi^{+}(X) \int dX_{1} \psi^{+}(X_{1}) \psi(X_{1})$$

$$- [(4p - \frac{20}{3}) 2^{2p-2} + \frac{5}{3}] \sum_{abc} \int dX_{1} dx_{2} dx_{2} \phi_{a}^{*}(Xx_{1}) \phi_{b}^{*}(X_{1}x_{2})$$

$$A_{a}^{+} A_{b}^{+} \psi(x_{2}) \times A_{c} \phi_{c}(X_{1}x_{1})$$

$$(28)$$

Donc :

$$e^{-i\lambda F} \psi^{+}(X) e^{i\lambda F} = \psi^{+}(X) + \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(i\lambda)^{2p+1}}{(2p+1)!} [\psi^{+}(X), F]_{2p+1}$$

$$+ \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(i\lambda)^{2p}}{(2p)!} [\psi^{+}(X), F]_{2p}$$
(29)

On a donc:

$$e^{-i\lambda F} \psi^{+}(X) e^{i\lambda F} = \psi^{+}(X) + (\cos \lambda - 1 - i \sin \lambda) \sum_{a} \int dx_{1} \phi_{a}^{*}(Xx_{1}) A_{a}^{+} \psi(x_{1}) + [\cos \lambda - 1 - \frac{1}{2} (\cos 2 \lambda - 1) + i (\frac{\sin 2\lambda}{2} - \sin \lambda)] \times$$

$$\sum_{\alpha} \int dx_{1} dx_{2} \phi_{a}^{*}(Xx_{1}) A_{a}^{+} \psi^{+}(x_{2}) \psi(x_{1}) \psi(x_{2})$$

$$+ 2 (\cos \lambda - 1) \sum_{ab} \int dX_{1} dx_{1} \phi_{a}^{*}(Xx_{1}) \phi_{b}(X_{1} x_{1}) A_{a}^{+} \psi^{+}(X_{1}) A_{b}$$

+ [ 
$$(\cos \lambda - 1) + i \sin^{3}\lambda$$
]  $\int dX_{1} \psi^{+}(X) \psi^{+}(X_{1}) \psi(X_{1})$   
+ [  $2(\cos \lambda - 1) + 2 \lambda \sin 2 \lambda + i (\frac{\lambda}{2} \cos 2 \lambda - \frac{13}{12} \sin 2 \lambda + \frac{5}{3} \sin \lambda)$ ] ×
$$\sum_{abc} \int dX_{1} dx_{1} dx_{2} \psi^{*}_{a}(X x_{1}) \psi^{*}_{b}(X_{1} x_{2}) A^{+}_{a} A^{+}_{b} \psi(x_{2}) \psi_{c}(X_{1} x_{1}) A_{c}$$
(30)

$$[\psi^{+}(\mathbf{x}), F]_{2p} = -\sum_{\mathbf{a}} \int dX_{1} \, \phi_{\mathbf{a}}^{*}(X_{1} \, \mathbf{x}) \, A_{\mathbf{a}}^{+} \, \psi(X_{1}) + \psi^{+}(\mathbf{x}) \int d\mathbf{x}_{1} \, \psi^{+}(\mathbf{x}_{1}) \, \psi(\mathbf{x}_{1})$$

$$- (1 - 2^{2p-1}) \sum_{\mathbf{a}} \int dX_{1} \, d\mathbf{x}_{2} \, \phi_{\mathbf{a}}^{*} \, (X_{1} \, \mathbf{x}) \, A_{\mathbf{a}}^{+} \, \psi^{+}(X_{2}) \, \psi(X_{1}) \, \psi(X_{2})$$

$$+ 2 \sum_{\mathbf{a}\mathbf{b}} \int dX_{1} \, d\mathbf{x}_{1} \, \phi_{\mathbf{a}}^{*}(X_{1} \, \mathbf{x}) \, A_{\mathbf{a}}^{+} \, \psi^{+}(\mathbf{x}_{1}) \, A_{\mathbf{b}} \, \phi_{\mathbf{b}}(X_{1} \, \mathbf{x}_{1})$$

$$- \left[ (\frac{13}{3} - 2p)2^{2p-1} - \frac{7}{3} \right] \sum_{\mathbf{a}\mathbf{b}\mathbf{c}} \int dX_{1} \, dX_{2} \, d\mathbf{x}_{1} \, \phi_{\mathbf{a}}^{*}(X_{1} \, \mathbf{x}) \, \phi_{\mathbf{b}}^{*}(X_{2} \, \mathbf{x}_{1})$$

$$\times \phi_{\mathbf{c}}(X_{1} \, \mathbf{x}_{1}) \, A_{\mathbf{a}}^{+} \, A_{\mathbf{b}}^{+} \, A_{\mathbf{c}}^{+} \, \psi(X_{2})$$

$$(31)$$

$$[ \psi^{+}(\mathbf{x}), F]_{2\mathbf{p}+1} = \sum_{\mathbf{a}} \int dX_{1} \phi_{\mathbf{a}}^{*}(X_{1}, \mathbf{x}) A_{\mathbf{a}}^{+} \psi(X_{1})$$

$$- (2^{2\mathbf{p}} - 1) \sum_{\mathbf{a}} \int dX_{1} dX_{2} \phi_{\mathbf{a}}^{*}(X_{1}, \mathbf{x}) A_{\mathbf{a}}^{+} \psi^{+}(X_{2}) \psi(X_{1}) \psi(X_{2})$$

$$+ \psi^{+}(\mathbf{x}) \int d\mathbf{x}_{1} \psi^{+}(\mathbf{x}_{1}) \psi(\mathbf{x}_{1})$$

$$- [(4\mathbf{p} - \frac{20}{3}) 2^{2\mathbf{p}-2} + \frac{5}{3} \sum_{\mathbf{abc}} dX_{1} dX_{2} d\mathbf{x}_{1} \phi_{\mathbf{a}}^{*}(X_{1}\mathbf{x}) \phi_{\mathbf{b}}^{*}(X_{2}, \mathbf{x}_{1})$$

$$\phi_{\mathbf{c}}(X_{1}, \mathbf{x}_{1}) A_{\mathbf{a}}^{+} A_{\mathbf{b}}^{+} A_{\mathbf{c}} \psi(X_{2})$$

$$e^{-i\lambda F} \psi^{+}(x) e^{i\lambda F} = \psi^{+}(x) - (\cos \lambda - 1 - i \sin \lambda) \sum_{a} \int dX_{1} \phi_{a}^{*}(X_{1}, x) A_{a}^{+} \psi(X_{1})$$

$$- [\cos \lambda - 1 - \frac{1}{2} (\cos 2\lambda - 1) + i (\frac{\sin 2\lambda}{2} - \sin \lambda)] \times$$

$$\sum_{a} \int dX_{1} dX_{2} \phi_{a}^{*}(X_{1} x) A_{a}^{+} \psi^{+}(X_{2}) \psi(X_{1}) \psi(X_{2})$$

$$+ 2 (\cos \lambda - 1) \sum_{ab} \int dX_{1} dx_{1} \phi_{a}^{*}(X_{1} x) \phi_{b}(X_{1} x_{1}) A_{a}^{+} \psi^{+}(x_{1}) A_{b} \qquad (33)$$

$$+ (\cos \lambda - 1 + i \sin \lambda) \int dx_{1} \psi^{+}(x) \psi^{+}(x_{1}) \psi(x_{1})$$

$$- [2(\cos \lambda - 1) + 2\lambda \sin 2\lambda + i (\frac{\lambda}{2} \cos 2\lambda - \frac{13}{12} \sin 2\lambda + \frac{5}{3} \sin \lambda)] \times$$

$$\times \sum_{abc} \int dX_{1} dX_{2} dx_{1} \phi_{a}^{*}(X_{1} x) \phi_{b}^{*}(X_{2} x_{1}) \phi_{c}(X_{1} x_{1}) A_{a}^{+} A_{b}^{+} \psi(X_{2}) A_{c}.$$

Les transformés de  $\psi(X)$  et  $\psi(x)$  s'obtiennent en prenant les adjoints de  $e^{-i\lambda F}$   $\psi^+(X)$   $e^{i\lambda F}$  et de  $e^{-i\lambda F}$   $\psi^+(x)$   $e^{i\lambda F}$ 

Dans les expressions (30) et (33) les opérateurs de champ  $\psi^+$  et  $\psi$  se rapportent à des particules libres (électrons ou protons), car leur contribution est à l'ordre zéro en  $\phi_{\alpha}$  ou  $\phi_{\alpha}^*$  (1).

On peut écrire l'expression  $e^{-i\lambda F}\psi^+(X)$   $e^{i\lambda f}$  sous la forme suivante :

$$\begin{split} & e^{-i\lambda f} \ \psi^{+}(X) \ e^{i\lambda f} = \psi^{+}(X) + z_{1} \sum_{a} \int dx_{1} \ \phi_{a}^{*}(X \ x_{1}) \ A_{a}^{+} \ \psi(x_{1}) \\ & + z_{2} \sum_{\alpha} \int dx_{1} \ dx_{2} \ \phi_{a}^{*}(X \ x_{1}) \ A_{a}^{+} \ \psi^{+}(x_{2}) \ \psi(x_{1}) \ \psi(x_{2}) \\ & + z_{3} \int dX_{1} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(X_{1}) \ \psi(X_{1}) \\ & + z_{4} \sum_{abc} \int dX \ dx_{1} \ dx_{2} \ \phi_{a}^{*}(X \ x_{1}) \ \phi_{b}^{*}(X_{1} \ x_{2}) \ A_{a}^{+} \ A_{b}^{+} \ \psi(x_{2}) \ A_{c} \ \phi_{c}(X_{1} \ x_{1}) \\ & + z_{5} \sum_{ab} \int dX_{1} \ dx_{1} \ \phi_{a}^{*}(X \ x_{1}) \ \phi_{b}(X_{1} \ x_{1}) \ A_{a}^{+} \ \psi^{+}(X_{1}) \ A_{b}. \end{split}$$

où 
$$z_1 = [\cos \lambda - 1 - i \sin \lambda]$$
  
 $z_2 = [\cos \lambda - 1 - \frac{1}{2} (\cos 2 \lambda - 1) + i (\frac{\sin 2\lambda}{2} - \sin \lambda)]$   
 $z_3 = [\cos \lambda - 1 + i \sin \lambda]$   
 $z_4 = 2(\cos \lambda - 1) + 2 \lambda \sin 2 \lambda + i (\frac{\lambda}{2} \cos 2 \lambda - \frac{13}{12} \sin 2 \lambda + \frac{5}{3} \sin \lambda]$   
 $z_5 = 2(\cos \lambda - 1)$ 

#### 2) NOYAUX DES ETATS LIES ET NON LIES.

On a pris un ensemble orthonormé et complet des états d'un proton et d'un électron.

On a les relations suivantes :

$$\sum_{\mathbf{a}} \phi_{\mathbf{a}}^{*}(\mathbf{X}\mathbf{x}) \phi_{\mathbf{a}}(\mathbf{X}^{\dagger} \mathbf{x}^{\dagger}) = \delta(\mathbf{X} - \mathbf{X}^{\dagger}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{\dagger}) : \text{relation de fermeture}$$

$$\int \phi_{\mathbf{a}}^{*}(\mathbf{X}\mathbf{x}) \phi_{\mathbf{b}}(\mathbf{X}\mathbf{x}) d\mathbf{X} d\mathbf{x} = \delta_{\mathbf{a}\mathbf{b}}$$
(35)

or 
$$\phi_{\mathbf{a}}(\mathbf{X}\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} c_{\alpha,\mathbf{a}} \phi_{\alpha}(\mathbf{X}\mathbf{x}) + \sum_{m} c_{m,\mathbf{a}} \phi_{m}(\mathbf{X}\mathbf{x})$$

La relation (34) devient :

$$\sum_{a,\alpha,\beta} C_{\alpha,a}^{*} C_{\beta,a}^{*} \phi_{\alpha}^{*}(Xx) \phi_{\beta}(X^{!} x^{!}) + \sum_{a,\alpha,m'} C_{\alpha,a}^{*} C_{m',a} \phi_{\alpha}^{*}(Xx) \phi_{m'}(X^{!} x^{!}) + \sum_{a,m,\beta} C_{m,a}^{*} C_{m,a}^{*} C_{m',a} \phi_{m'}^{*}(Xx) \phi_{m'}(X^{!} x^{!}) + \sum_{a,m,m'} C_{m,a}^{*} C_{m',a} \phi_{m'}^{*}(Xx) \phi_{m'}(X^{!} x^{!})$$

or 
$$\sum_{\mathbf{a}} C_{\alpha,\mathbf{a}}^{*} C_{\beta,\mathbf{a}} = \delta_{\alpha\beta}$$

$$\sum_{\mathbf{a}} C_{\mathbf{m},\mathbf{a}}^{*} C_{\beta,\mathbf{a}} = \sum_{\mathbf{a}} C_{\alpha,\mathbf{a}}^{*} C_{\mathbf{m}^{1},\mathbf{a}} = 0$$

$$\sum_{\mathbf{a}} C_{\mathbf{m},\mathbf{a}}^{*} C_{\mathbf{m}^{1},\mathbf{a}} = \delta(\mathbf{m}^{1} - \mathbf{m})$$

Finalement la relation (34) devient :

$$\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^{*}(X\mathbf{x}) \phi_{\alpha}(X^{\dagger} \mathbf{x}^{\dagger}) + \sum_{m} \phi_{m}^{*}(X \mathbf{x}) \phi_{m}(X^{\dagger} \mathbf{x}^{\dagger})$$

Soit 
$$\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^{*}(Xx) \phi_{\alpha}(X^{!} x^{!}) = \Delta(Xx, X^{!} x)$$
 on appelle  $\Delta(X_{x}, X^{!}x^{!})$  le noyau de l'état lié

$$\sum_{m} \phi_{m}^{*}(Xx) \phi_{m^{1}}(X^{!}x^{!}) = \Gamma(Xx, X^{!}x^{!})$$
on appelle  $\Gamma(Xx, X^{!}x^{!})$  le noyau de l'état non lié.

Donc 
$$\Delta(Xx, X^{\dagger}x^{\dagger}) + \Gamma(Xx, X^{\dagger}x^{\dagger}) = \delta(X - X^{\dagger}) \delta(x - x^{\dagger})$$
 (36)

cette décomposition permettra de voir dans l'expression de l'hamiltonien les opérateurs de champs des états liés et non liés.

#### 3) CALCUL DE L'HAMILTONIEN TRANSFORME.

L'Hamiltonien H(23) agit dans l'espace S, espace de Schrodinger. Dans l'espace S, seules les variables de l'électron et du proton apparaissent explicitement, l'existence et les propriétés des atomes ne se manifestent pas. La transformation T permet non seulement d'avoir les variables du proton et de l'électron comme variables dynamiques du système, mais aussi celles des atomes ; on aura dans l'hamiltonien transformé  $T^{-1}$  HT tous les processus de diffusion atomique, ionisation, recombinaison, etc.... Le calcul de  $T^{-1}$  HT consiste à substituer les transformés des opérateurs  $\psi^+$  et  $\psi$  dans (24) et mettre tous les produits d'opérateurs sous la forme normale c'est à dire les créateurs à gauche, les annihilateurs à droite en utilisant les relations de commutation ou d'anticommutation calculées dans l'algèbre.

On obtient l'Hamiltonien transformé:

$$T^{-1}$$
 HT =  $T_p$  +  $T_e$  +  $V_{pp}$  +  $V_{ee}$  +  $V_{pe}$   
+  $H_A$  +  $H_{AA}$  +  $H_{Ap}$  +  $H_{Ae}$  +  $H(pe + A)$  +  $H(A + pe)$   
+  $H(ppee + AA)$  +  $H(AA + ppee)$   
+  $H(peA + AA)$  +  $H(AA + peA)$   
(37)  
+  $H(pee + pA)$  +  $H(pA + ppe)$ 

Le détail de ces expressions se trouve en annexe.

#### 4) INTERPRETATION DES DIFFERENTS TERMES DE L'HAMILTONIEN :

Considérons les termes  $T_p$ ,  $T_e$ ,  $V_{pp}$  et  $V_{ee}$ , ces termes sont formellement les mêmes que ceux de l'Hamiltonien H(23) mais l'interprétation est différente, ils se rapportent à des protons et électrons libres.

$$T_{\mathbf{p}} = \int d\mathbf{X} \ \psi^{+}(\mathbf{X}) \ T(\mathbf{X}) \ \psi(\mathbf{X})$$

$$T_{\mathbf{e}} = \int d\mathbf{X} \ \psi^{+}(\mathbf{x}) \ T(\mathbf{x}) \ \psi(\mathbf{x})$$

$$V_{\mathbf{pp}} = \int d\mathbf{X} \ d\mathbf{X}^{\dagger} \ \psi^{+}(\mathbf{X}) \ \psi^{+}(\mathbf{X}^{\dagger}) \ V(\mathbf{X}\mathbf{X}^{\dagger}) \ \psi(\mathbf{X}^{\dagger}) \ \psi(\mathbf{X})$$

$$V_{\mathbf{ee}} = \int d\mathbf{x} \ d\mathbf{x}^{\dagger} \ \psi^{+}(\mathbf{x}) \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{\dagger}) \ V(\mathbf{x}\mathbf{x}^{\dagger}) \ \psi(\mathbf{x}^{\dagger}) \ \psi(\mathbf{x})$$
(38)

 $H_{\Lambda}$  désigne l'Hamiltonien d'un atome :

$$\begin{split} H_{A} &= \sum_{\alpha\beta} A_{\alpha}^{+} < \alpha |H| \beta > A_{\beta} \\ \\ où &< \alpha |H| \beta > = z_{1} \overline{z_{1}} \int dX dx \phi_{a}^{*}(X x) [T(X) + T(x) + V(X x)] \phi_{\beta} (Xx) \\ \\ z_{1} &= (\cos \lambda - 1 - i \sin \lambda) \end{split}$$

- Les processus d'ionisation et de recombinaison sont décrits par :

$$H(pe + A)$$
 et  $H(A + pe)$ 

$$H(pe + A) = \sum_{\alpha} \int dX^{\dagger} dx^{\dagger} \psi^{\dagger}(X^{\dagger}) \psi^{\dagger}(x^{\dagger}) \leq X^{\dagger} x^{\dagger} |H| \alpha > A_{\alpha}$$

où

$$< X^{1} x^{1} |H| \alpha = (\overline{z}_{1} + z_{1}\overline{z}_{1}) \times \int dX dx \Gamma(Xx, X^{1} x^{1}) [T(X) + T(x) + V(Xx)] \phi_{\alpha} (Xx)$$

$$[H(pe + A)]^+ = H(A + pe)$$

$$\Gamma(Xx, X' x')$$
 est le noyau de l'état non lié.

$$\Gamma(X\mathbf{x}, X^{\dagger} \mathbf{x}^{\dagger}) = \sum_{\mathbf{m}} \phi_{\mathbf{m}}^{*}(X\mathbf{x}) \phi_{\mathbf{m}}(X^{\dagger} \mathbf{x}^{\dagger})$$

puisque les  $\phi_{m}^{*}$  sont orthonormés on a :

$$\int dX^{\dagger} dx^{\dagger} \Gamma(Xx, X^{\dagger} x^{\dagger}) \phi_{m}(X^{\dagger} x^{\dagger}) = \phi_{m}(Xx)$$

 $\phi_{m}$  (X x) est la fonction d'onde du proton et de l'électron libres.

V est l'énergie d'interaction entre protons libres et électrons libres

$$V_{pe} = \int dX^{1} dx^{1} dx^{1} dx^{1} dx^{1} \psi^{+}(X^{1}) \psi^{+}(x^{1}) \leq X^{1} x^{1} |H| |X^{1}| x^{1} > \psi(x^{1}) |\psi(X^{1})|$$

οù

$$< X^{\dagger} X^{\dagger} |H| X^{\dagger} x^{\dagger} > = \int dX dx r^{*}(Xx, X^{\dagger} x^{\dagger}) V(Xx) r(Xx, X^{\dagger} x^{\dagger}).$$

 $V_{
m pe}$  est identique à  $H_{
m pe}$  défini dans l'Hamiltonien de Girardeau, il suffit de remplacer  $\Delta$  dans  $H_{
m pe}$  : par  $\delta$  -  $\Gamma$ 

$$\begin{split} &H_{AA} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \quad A_{\alpha}^{+} A_{\beta}^{+} < \alpha\beta \mid H \mid \gamma\delta > A_{\gamma} A_{\delta} + c.h. \\ &où: < \alpha\beta \mid H \mid \gamma\delta > = < \alpha\beta \mid H \mid \gamma\delta >_{1} + < \alpha\beta \mid H \mid \gamma\delta >_{2} \\ &où < \alpha\beta \mid H \mid \gamma\delta >_{1} = \int \quad dX \; dX^{\dagger} \; dx \; dx^{\dagger} \; \phi_{\alpha}^{*}(Xx) \; \phi_{\beta}^{*}(X^{\dagger} \; x^{\dagger}) \qquad \left\{ \frac{1}{4} \; a_{1} \right\} \end{split}$$

Cet élément de matrice désigne l'énergie de deux atomes lors d'une collision élastique.

C.h. désigne le conjugué hermitique.

Les coefficients complexes a, b, c sont explicités en annexe.

Par ailleurs, 
$$<\alpha\beta \ |H| \ \gamma\delta>_2 = \int dX \ dX^{\scriptscriptstyle \dagger} \ dx \ dx^{\scriptscriptstyle \dagger} \ \phi_\alpha^*(Xx) \ \phi_\beta^*(X^{\scriptscriptstyle \dagger} \ x^{\scriptscriptstyle \dagger}) \ \left\{ \frac{1}{2} \ a_2 \ [T(X) + T(X^{\scriptscriptstyle \dagger}) + T(X^{\scriptscriptstyle \dagger}) + T(X^{\scriptscriptstyle \dagger}) + T(X^{\scriptscriptstyle \dagger}) \right\} \right. \\ + \left. T(x) + T(x^{\scriptscriptstyle \dagger}) \right] + \left. \frac{1}{2} \ \overline{b}_3 \ [V(Xx) + V(X^{\scriptscriptstyle \dagger}x^{\scriptscriptstyle \dagger})] + \frac{1}{2} \ c_2 \ [V(XX^{\scriptscriptstyle \dagger}) + V(xx^{\scriptscriptstyle \dagger})] \right\} \times \\ \times \left. \phi_\gamma \ (Xx^{\scriptscriptstyle \dagger}) - \phi_\delta \ (X^{\scriptscriptstyle \dagger}x) \right.$$

Cet élément de matrice désigne l'énergie de deux atomes lors d'une collision avec échange des électrons entre les deux at mes

< \$\alpha\beta \|\_{H}| \|\_{\gamma}\delta >\_2 \quad s'annule si les domaines des fonctions d'onde  $\phi_{\gamma}$  et  $\phi_{\delta}$  ne se recouvrent pas.

$$\begin{split} H_{AP} &= \int dX \ dX^{\dag} \ A_{\alpha}^{\dag} \ \psi^{\dag}(X^{\dag}) &< \alpha X^{\dag} \ |H| \ \beta X > \psi(X) \ A_{\beta} \\ \\ où: &< \alpha X^{\dag} \ |H| \ \beta X > = \ < \alpha X^{\dag} \ |H| \ \beta X >_{1} \ + \ < \alpha X^{\dag} \ |H| \ \beta X >_{2} \\ \\ où: &< \alpha X^{\dag} \ |H| \ \beta X >_{1} \ = \ \int dx \ \phi_{\alpha}^{\dag}(Xx) \ \left\{ \begin{array}{c} \frac{1}{2} \ z_{5} \left[ T(X) \ + T(X^{\dag}) \right] \ + \ a_{4} \ T(x) \ + \\ \\ + \frac{1}{2} \ \overline{b}_{5} \ \left[ V(Xx) \ + V(X^{\dag}x) \right] - z_{1} \overline{z}_{1} \ V(XX^{\dag}) \ \right\} \ \phi_{\beta}^{\dag}(X^{\dag}x) \end{split}$$

Cet élément représente l'énergie d'un atome et d'un proton libre lors d'une collision sans cassure de l'atome avec échange des protons ; ce terme s'annule si le proton libre n'appartient pas au domaine de la fonction d'onde de l'atome.

Par ailleurs :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha X' \mid H \mid \beta X \right\}_{2} = \delta(X - X') \int dY \, dy \, \phi_{\alpha}^{*}(Yy) \, \left\{ \begin{array}{l} a_{3} \, T(Y) + a_{5} \, T(y) + \\ + 2 \, z_{1} \overline{z}_{1} \, V(XY) + b_{4} \, V(Yy) + z_{1} \overline{z}_{1} \, V(X'y) \right\} \\ \end{array} \right. \phi_{\beta} \, (Yy) \, \psi(X) \, A_{\beta}$$

Ce terme représente l'énergie d'un atome et d'un proton libre lors d'une collision élastique.

$$H_{Ae} = \int d\mathbf{x} \ \tilde{d}\mathbf{x}^{\dagger} \ A_{\alpha}^{\dagger} \ \psi^{\dagger}(\mathbf{x}^{\dagger}) < \alpha \mathbf{x}^{\dagger} \ |H| \ \beta \mathbf{x} > \psi(\mathbf{x}) \ A_{\beta}$$

C'est l'Hamiltonien d'un atome et d'un électron libre en collision, il a la même expression que  $H_{Ap}$ , il suffit de remplacer les coordonnées des protons dans  $H_{Ap}$  par ceux des électrons et inversement.

$$H(ppe + pA) = \int dX'' dx'' dX'' \psi^{+}(X'') \psi^{+}(X'') \psi^{+}(X') < X'' x'' X |H| X' \alpha > A_{\alpha} \psi(X')$$
où :
$$< X'' x'' X |H| X' \alpha > = \int dX dx r^{*}(Xx, X''x'') [\overline{a}_{11} T(x) + \overline{a}_{12} T(x) + \overline{b}_{20} V(Xx) + \overline{b}_{10} V(X'x) + \overline{z}_{5} T(X')] \phi_{\alpha} (Xx)$$

Cet élément représente l'Hamiltonien d'un proton libre et d'un atome lors d'une collision avec dissociation de l'atome.

H(pA + ppe) = [H(ppe + pA)] + représente le processus dans lequel deux protons et un électron rentrent en collision pour former un atome et un proton.

H(pee + eA) a la même expression que H(ppe + pA) il suffit de remplacer les protons par les électrons et les électrons par les protons dans H(ppe + pA) ce processus représente la collision d'un électron et d'un atome avec cassure de l'atome.

$$H(ppee + AA) = \sum_{\alpha\beta} \int dX^{ii} dx^{ii} dx^{ii} dx^{ii} \psi^{+}(X^{iii}) \psi^{+}(x^{ii}) \psi^{+}(X^{ii}) \psi^{+}(x^{ii})$$

$$< X^{iii} x^{iii} X^{ii} x^{ii} |H| \alpha \beta > A_{\alpha}A_{\beta}$$

où:

$$< X^{\text{III}} \quad X^{\text{III}} \quad X^{\text{III}} \quad X^{\text{III}} \quad |H| \quad \alpha\beta> = \int \! dX \ dx \ dX^{\text{I}} \quad dx^{\text{I}} \quad \Gamma^*(Xx, X^{\text{II}}x^{\text{II}}) \quad \Gamma^*(X^{\text{I}}x^{\text{I}}, X^{\text{III}} \ x^{\text{III}}) \quad \times \\ \times \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} \ \overline{a}_7 \ [T(X) \ + \ T(X^{\text{I}}) \ + \ T(X^{\text{I}}) \ + \ T(X^{\text{I}}) \end{array} \right] + \frac{\overline{b}_9}{2} \quad [V(Xx^{\text{I}}) \ + \ V(X^{\text{I}}x)] \\ + \quad \frac{\overline{b}_{10}}{2} \quad [V(Xx) \ + \ V(X^{\text{I}}x^{\text{I}})] \quad + \quad \overline{c}_3 \quad V(XX^{\text{I}}) \\ \end{array} \right\} \phi_{\alpha} \quad (Xx) \quad \phi_{\beta} \quad (X^{\text{I}} \quad x^{\text{I}}).$$

Ce terme représente le processus dans lequel deux atomes rentrent en collision avec dissociation des deux.

 $H(AA + ppee) = [H(ppee + AA)]^{+}$ . Ce terme représente le processus dans lequel deux protons et deux électrons s'unissent pour former deux atomes.

$$H(Ape + AA) = \sum_{\alpha\beta\gamma} \int dX'' dx'' A^{+} \psi^{+}(X'') \psi^{+}(x'') < \alpha X'' x'' |H| \beta\gamma > A_{\beta}A_{\gamma}$$

οù

$$< \alpha X'' x'' \mid H \mid \beta \gamma > = < \alpha X'' x'' \mid H \mid \beta \gamma >_1 + < \alpha X'' x'' \mid H \mid \beta \gamma >_2$$

avec:  $\left\langle \alpha X'' \ x'' \ | H | \ \beta \gamma \right\rangle_{1} = \int \! dX \ dx \ dX' \ dx'' \ r^{*}(Xx, \ X'' \ x'') \ \phi_{\alpha}^{*}(X'x') \ A_{\alpha}^{+} \Psi^{+}(X'') \times \left\{ z_{4} \overline{z}_{4} \left[ T(X) + T(x) \right] + \overline{a}_{10} \left[ T(X') + T(x') \right] + \overline{c}_{5} \left[ V(XX') + V(xx') \right] + \overline{b}_{16} V(X'x) + \overline{b}_{14} V(X'x') + \overline{b}_{12} V(Xx) + \overline{b}_{18} V(Xx') \right\} \right.$ 

Ce terme représente le processus dans lequel deux atomes rentrent en collision avec dissociation de l'un d'eux.

$$< \alpha X'' x'' |H| \beta \gamma >_{2} = \int dX dx dX' dx' r^{*}(Xx, X''x'') \phi_{\alpha}^{*}(X'x') \left\{ \vec{a}_{8}[T(X) + T(x)] + \vec{a}_{9}[T(X') + T(x')] + \vec{c}_{4}[V(XX') + V(xx')] + \vec{b}_{11}V(Xx) + \vec{b}_{13} \right.$$

$$V(Xx') + \vec{b}_{15}(Xx') + \vec{b}_{17}V(X'x) \left\} \phi_{\beta}(X'x) \phi_{\gamma}(Xx') \right.$$

Ce terme représente le processus dans lequel deux atomes rentrent en collision avec dissociation de l'un d'eux et échange des électrons entre les atomes ; ce terme s'annule si les fonctions d'onde des deux atomes ne se recouvrent pas.

### CONCLUSION:

Notre travail a été basé sur le formalisme mathématique des algèbres graduées, qui nous a permis de construire l'algèbre des opérateurs d'un système de particules composées et libre en seconde quantification, et d'obtenir toutes les relations de commutation et d'anticommutation qui caractérisent ce système, et cela, dans le cas physique d'un plasma d'hydrogène partiellement ionisé (cas non relativiste).

Le choix de la transformation T permet d'obtenir dans l'expression de la transformée T<sup>-1</sup> HT les opérateurs de champ des particules composées ( "atomes physiques" ) comme variables dynamiques du système ; ce n'était pas le cas dans les travaux antérieurs traitant de ce sujet ; dans l'hamiltonien de Girardeau (1) rentrent les opérateurs d'atomes "idéaux" dont la signification physique semble obscure.

L'hamiltonien général obtenu contient tous les hamiltoniens des processus pouvant se produire entre les atomes, les électrons et les protons.

Notre étude a permis donc l'unification de la théorie des particules composées et celles des particules constituentes.

Une généralisation de ce travail à des plasmas contenant des atomes dont le cortège électronique est supérieur à un est possible, moyennant un choix adéquat de l'opérateur F; cette étude pourra s'appliquer au formalisme moléculaire en seconde quantification.

# A N N E X E 1 \*\*\*\*\*\*\*\*\*

Calcul des transformés des opérateurs  $\psi^+(X), \ \psi^+(X)$ 

on a 
$$F = \sum_{\mathbf{a}} A_{\mathbf{a}}^{+} A_{\mathbf{a}} - \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}^{1} d\mathbf{x}^{11} \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{1}) \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{11}) \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{11}) \ \psi(\mathbf{x}^{11})$$

$$- \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}^{11} d\mathbf{x}^{11} \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{11}) \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{11}) \ \psi(\mathbf{x}^{11}) \ \psi(\mathbf{x}^{11})$$

$$= \int d\mathbf{x}^{11} d\mathbf{x}^{11} \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{11}) \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{11}) \ \psi(\mathbf{x}^{11}) - \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}^{11} d\mathbf{x}^{11} \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{11}) \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{11})$$

$$- \frac{1}{2} d\mathbf{x}^{11} d\mathbf{x}^{11} \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{11}) \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{11}) \ \psi^{+}(\mathbf{x}^{11}) \ \psi(\mathbf{x}^{11})$$

$$[\ \psi^{+}(X),F]_{1} = -\int dx_{1} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi((x_{1}) + \psi^{+}(X) \ \int dx_{1} \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi(x_{1})$$

pour calculer  $\left[\begin{array}{cc} \psi^+(X), \ F \right]_2$  il faut calculer :

$$[\ -\ \int dx_1\ \psi^+(X)\ \psi^+(x_1)\ \psi(x_1),\ F] \qquad {\rm et} \qquad [\ \int dx_1\ \psi^+(X)\ \psi^+(X_1)\ \psi(X_1),\ F]$$

$$[\int dx_1 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi(x_1), \ F] = - \int dx_1 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi(x_1) \ +]$$

$$+ \int dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi(x_1) \ \psi(x_2)$$

$$+ \int dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_1) \ \psi(x_1) \ \psi(x_1)$$

$$\int dx_1 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi(x_1), \ F] = \psi^+(x) \int dx_1 \ \psi^+(x_1) \ \psi(x_1) \ +$$

$$- \int dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi(x_1) \ \psi(x_2) \ +$$

$$- \int dx_1 \ dx_1 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_1) \ \psi(x_1) \ \psi(x_1)$$

Mais on va éliminer les collisions multiples c'est à dire éliminer les termes qui ont plus de deux créateurs à gauche.

On peut écrire les relations précédentes en fonction des opérateurs crétaeurs et annihilateur des états d'un proton et d'un électron, en effet :

$$\int dx_{1} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi(x_{1}) = \sum_{a} \int dx_{1} \ \phi_{a}^{*}(Xx_{1}) \ A_{a}^{+} \ \psi(x_{1})$$

$$\int dx_{1} \ dx_{2} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi^{+}(x_{2}) \ \psi(x_{1}) \ \psi(x_{2}) = \sum_{a} \int dx_{1} \ dx_{2} \ \phi_{a}^{*}(Xx_{1})$$

$$A_{a}^{+} \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi(x_{1}) \ \psi(x_{2})$$

$$\int dX_{1} \ dx_{1} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(X_{1}) \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi(x_{1}) \ \psi(X_{1}) =$$

$$= -\sum_{a} \int dX_{1} \ dx_{1} \ \phi_{a}^{*}(Xx_{1}) \ A_{a}^{+} \ \psi^{+}(X_{1}) \ A_{b} \ \phi_{b}(X_{1} \ x_{1})$$

 $\int dX_1 \ dX_2 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_2) \ \psi(X_1) \ \psi(X_2) \qquad \text{ce terme ne peut pas être mis} \\ \text{sur la fonction des opérateurs des états d'un proton et d'un électron, il} \\ \text{contient trois créateurs à gauche par conséquent il sera éliminé.}$ 

Il faut calculer le commutateur suivant :

$$[\int dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(X) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi(x_1) \ \psi(x_2), \ F] \quad \text{pour connaître } [\psi^+(X), \ F]_4$$

$$\left[ \int dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(X) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi(x_1) \ \psi(x_2), \ F \right] =$$

$$- 2 \int dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(X) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi(x_1) \ \psi(x_2)$$

$$- \int dx_1 \ dx_2 \ dx_3 \ \psi^+(X) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi^+(x_3) \ \psi(x_1) \ \psi(x_2) \ \psi(x_3)$$

$$- \int dx_1 \ dx_1 \ dx_1 \ dx_1 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi(x_1) \ \psi(x_2) \ \psi(X_1)$$

$$\left[ \int dx_1 \ dX_1 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi(X_1) \ \psi(X_1), \ F \right] =$$

$$\int dX_1 \ dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_2) \ \psi(X_1) \ \psi(X_2) \ \psi(X_1)$$

$$- \int dX_1 \ dX_2 \ dx_1 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_2) \ \psi^+(X_1) \ \psi(X_1) \ \psi(X_2) \ \psi(X_1) .$$

$$\int dx_1 \ dx_2 \ dx_3 \ \psi^+(X) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi^+(x_3) \ \psi(x_1) \ \psi(x_2) \ \psi(x_3)$$
 et 
$$\int dX_1 \ dX_2 \ dx_1 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_2) \ \psi^+(x_1) \ \psi(X_1) \ \psi(X_2) \ \psi(x_1)$$
 seront négligés (il contiennent plus de 2 créateurs à gauche).

$$\int dX_1 dx_1 dx_2 \psi^+(X) \psi^+(X_1) \psi^+(X_1) \psi^+(X_2) \psi(X_1) \psi(X_2) \psi(X_1)$$

$$= \sum_{abc} \int dX_1 dx_1 dx_2 \phi_a^*(XX_1) \phi_b^*(X_1 X_2) A_a^+ A_b^+ A_c \psi(X_2) \phi_c(X_1 X_1)$$

Le seul commutateur qui reste à connaître est :

$$[\int dx_1 \ dx_2 \ dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi(x_1) \ \psi(x_2) \ \psi(x_1), \ F]$$

$$= -2 \int dx_1 \ dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi(x_1) \ \psi(x_2) \ \psi(x_1)$$

$$- \int dx_1 \ dx_2 \ dx_3 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi^+(x_2) \ \psi^+(x_2) \ \psi(x_2) \ \psi(x_2) \ \psi(x_1)$$

$$- 2 \int dx_1 \ dx_2 \ dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi^+(x_2) \ \psi^+(x_2) \ \psi(x_2) \ \psi(x_2) \ \psi(x_1)$$

Les deux derniers termes seront négligés (ils contiennent plus de deux créateurs

On a donc les termes (utiles), c'est à dire les termes de la forme 
$$\int dx_1 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi(x_1), \quad \int dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi^+(x_2) \ \psi(x_2)$$
 
$$\int dx_1 \ dx_1 \ dx_1 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \ \psi(x_1) \ \psi(x_1), \quad \int dx_1 \ dx_1 \ dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(x) \ \psi^+(x_1) \psi^+(x_2) \times \psi(x_2) \times \psi(x_1), \quad \int dx_1 \ \psi^+(x_1) \ \psi(x_2) \ \psi(x_1), \quad \int dx_1 \ \psi^+(x_1) \ \psi(x_1) \ \psi(x_2) \ \psi(x_1), \quad \int dx_1 \ \psi^+(x_1) \ \psi(x_1) \ \psi(x_1)$$

En résumé on aura:

$$[ \psi^{+}(X), F ]_{1} = - \psi^{+}(X)$$

$$[ \psi^{+}(X), F ]_{1} = - \psi^{+}(X)$$

$$[ \psi^{+}(X), F ]_{2} = \psi^{+}(X)$$

$$[ \psi^{+}(X$$

$$[\ \psi^{+}(X),\ F]_{3} = -\ \psi^{+}(X) \int dx_{1} \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi(x_{1}) + (1+2) \int dx_{1} \ dx_{2} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x_{1}) \times (x_{1}) \times (x_{2}) + [1+(-2)] \ dX_{1} \ dx_{1} \ dx_{2} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(X_{1}) \times (x_{2}) \times (x_{2}) + [1+(-2)] \ dX_{1} \ dx_{1} \ \psi^{+}(X_{1}) \ \psi^{+}(X_{1}) \times (x_{2}) \times (x_{2}) \times (x_{2}) + (x_{2}) \times (x_{2}$$

[ 
$$\psi^{+}(X)$$
,  $F$ ]<sub>4</sub> =  $\int dx_{1} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi(x_{1}) - (1+(1+2)2) \int dx_{1} \ dx_{2} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x_{1})$ 

$$\times \ \psi^{+}(x_{2}) \ \psi(x_{1}) \ \psi(x_{2})$$

$$- 2 \int dX_{1} \ dx_{1} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(X_{1}) \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi(x_{1}) \ \psi(X_{1})$$

$$+ [ - (1+2) + (1+(-2))(-2)] \int dX_{1} \ dx_{1} \ dx_{2} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(X_{1})$$

$$\times \ \psi^{+}(x_{2}) \ \psi(x_{1}) \ \psi(x_{2}) \ \psi(X_{1})$$

$$+ \ \psi^{+}(X) \int dX_{1} \ \psi^{+}(X_{1}) \ \psi(X_{1})$$

un raisonnement par récurrence conduit à :

$$[\psi^{+}(X), F]_{2p} = \int dx_{1} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi(x_{1}) - (\frac{1-2^{2p-1}}{1-2}) \int dx_{1} \ dx_{2} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x_{1}) \times \psi^{+}(x_{2}) + (x_{1}) \psi(x_{2})$$

$$\times \psi^{+}(x_{2}) \psi(x_{1}) \psi(x_{2})$$

$$- 2 \int dx_{1} \ dx_{1} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x_{1}) \psi^{+}(x_{1}) \psi(x_{1})$$

$$+ [(\frac{13}{3} - 2p) \ 2^{2p-2} - \frac{7}{3}] \int dx_{1} \ dx_{1} \ dx_{2} \ \psi^{+}(X) \psi^{+}(x_{1}) \psi^{+}(x_{1}) \psi^{+}(x_{2}) \times$$

$$\times \psi(x_{1}) \psi(x_{2}) \psi(x_{1})$$

 $+ \ \psi^+(x) \ \int \ dx_1 \ \psi^+(x_1) \ \psi(x_1)$ 

et [ 
$$\psi^{+}(X)$$
, F ]  $_{2p+1} = -\int dx_{1} \ \psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi(x_{1}) + (\frac{1-2^{2p}}{1-2}) \int dx_{1} \ dx_{2}$ 

$$\psi^{+}(X) \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi^{+}(x_{2}) \ \psi(x_{1}) \ \psi(x_{2})$$

$$+ \psi^{+}(X) \int dX_{1} \ \psi^{+}(X_{1}) \ \psi(X_{1}) \ +$$

$$+ [(4p - \frac{20}{3}) \ 2^{2p-2} + \frac{5}{3}] \ \psi^{+}(X) \int dX_{1} \ dx_{1} \ dx_{2} \ \psi^{+}(X_{1}) \ \psi^{+}(x_{1}) \ \psi(x_{1}) \ \psi(x_{2}) \ \psi(X_{1})$$

### Démonstration:

Supposons que c'est vrai à l'ordre 2p et montrons que c'est vrai à l'ordre 2p+1.

$$+ \left( \frac{1-2^{2p-1}}{1-2} \right) \int dX_1 \ dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_2) \ \psi(X_1) \ \psi(X_2) \ \psi(X_1)$$

$$- 2 \int dX_1 \ dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_2) \ \psi(X_1) \ \psi(X_2) \ \psi(X_1)$$

$$+ \left[ \left( \frac{13}{3} - 2p \right) \ 2^{2p-2} - \frac{7}{3} \ \right] \ (-2) \int dX_1 \ dx_1 \ dx_2 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_2)$$

$$\psi(X_1) \ \psi(X_2) \ \psi(X_1)$$

$$+ \psi^+(X) \int dX_1 \ \psi^+(X_1) \ \psi(X_1) \ - \int dX_1 \ dx_1 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi(X_1)$$

$$= - \int dX_1 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi(X_1)$$

$$+ \left[ 1 + \left( \frac{1 - 2^{2p-1}}{1 - 2} \right) 2 \ \right] \int dX_1 \ dX_2 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_2) \ \psi(X_1) \ \psi(X_2)$$

$$+ \left[ - 2 + \left[ \frac{1 - 2^{2p-1}}{1 - 2} \right] + \left( \left( \frac{13}{3} - 2p \right) \ 2^{2p-2} - \frac{7}{3} \right) \ (-2) \ \right) \right] \int dX_1 \ dX_1 \ dX_2$$

$$\psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_2) \ \psi(X_1) \ \psi(X_2) \ \psi(X_1)$$

$$+ \psi^+(X) \int dX_1 \ \psi^+(X_1) \ \psi(X_1) \ + \left( \frac{1 - 2^{2p}}{1 - 2} \right) \int dX_1 \ dX_2 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_2) \psi(X_1) \psi(X_2)$$

$$+ \left[ \left( 4p - \frac{20}{3} \right) \ 2^{2p-2} + \frac{5}{3} \ \right] \int dX_1 \ dX_1 \ dX_2 \ \psi^+(X) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi(X_2) \ \psi(X_1)$$

$$+ \psi^+(X) \int dX_1 \ \psi^+(X_1) \ \psi(X_1) \ \psi(X_1) \ \psi^-(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi^+(X_1) \ \psi(X_2) \ \psi(X_1) \psi(X_2) \psi(X_2) \ \psi(X_1) \psi(X_2) \psi(X_2) \ \psi(X_1) \psi(X_2) \psi(X_2) \psi(X_2) \ \psi(X_1) \psi(X_2) \psi$$

Une démonstration analogue pour l'ordre pair.

Démonstration analogue pour  $e^{-i\lambda F}\psi^+(x)$   $e^{i\lambda F}$  il suffit de remplacer x par X puisque l'opérateur F est symétrique en x et X.

## Annexe II

Calcul de l'Hamiltonien transformé

1) Calcul de 7-1 TPT T-1TP, T = Sdx T-14+(x)TT(x) T-14(x) T = Jdx { [4+(x) + 3, 2 ] dz, \$\delta^\*(xz) A^\*\_a 4(z, 1) + 3, 2 ] dx, dz \$\delta^\*(xz) A^\*\_a 4(z, 1) 4(z)\$ + 33 (dx, 4 +(x) 4+(x) 4(x2) + 34 = (x2) dx1 dx2 dx2 dx (x2) A+ A+ 4(x2) Ae +6(x2) + (x2) + ( ·+ 35 = 5 | dx dz 1 & (xz) & (xz) & (x,z) A + (x1) A 5 | T(x) = [4(x) + 3, 2 | dz/d, (xx/) + (x/) A 2 + 32 2 / dr' dr' da (xz') 4+(z') 4(z') 4(z') 4(z') 4a, +33 / dx' 4+(x') 4(x') 4(x) + + 34 2 (X' x') A' dz' dz' dz' dz' (Xx') dy (X' x') de' (X' x') A' +35 26' Sdx'dz' da, (Xz') & (X', z') A, 4 (X', Aa') . On effectue le produit et on met le resultat obtenu sous le forme normale c. à d les operateurs createurs à gauche, les operateurs annihilateurs à droite; on exprime les fa en fonction des qu'et In pour faire apporaiser les états lies et non lies. Il fant remarquer que dans l'expression de 7-47. Tai dessus, les operateurs et et et se rapportent à des particules libres car ce sont des elements de Les sons espace suipair de l'algebre L. example: 4+(x) T(x) (3- 2 ) dz' da, (Xx') 4+(2') Aa') = 3, 2 Sdx'dx 4+(x)4+(x) T(x)Aa, 4a, (xxx) 4+(X)4+(24) caracterise un proton libre et un electron libre, par consequent on le decompose seu la base des états libres.  $f(x) + f(x) + f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( \frac{x x_1}{x_2} \right) A_{m} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( \frac{x x_2}{x_1} \right) dx dx$ 

7-4 Tp T = Jdx 4+(x) T(x) 4(x) + 3,3, 2 Jdxdr 4+(xx) A2 T(x) AB 4/2(xx) + 3434 2 2 2 4XdX/dzdz 4 (Xx) 4 (Xx) 4 (Xx) 4 + 7 + 7 (X) Az Az (Xx) 4 (Xx) 4 (Xx). + (3431-23434) 2 pss JAXAXAXAX dx (xx) ff (xx) Ax Ax T(X) A 2 A (xx) 4 (xx) 4 h.c

+ 35 \( \frac{2}{4} \frac{4}{3} \frac{4^\*}{4} \( \chi\_1 \) \( \chi\_2 \) \( \frac{2}{2} \frac{5}{3} \frac{5}{3} \) \( \frac{4}{2} \frac{5}{3} \frac{5}{3} \) \( \frac{2}{2} \frac{5}{3} \frac{5}{3} \frac{5}{3} \) \( \frac{2}{2} \frac{5}{3} \frac{5}{

+ (-2 3,3, +323, -2 322) 2 (1xdxdx, 4\*(x)) 4+(x)) 7(x) 4(x) # 4(x) + 6.C.

+ (- 325, + 2 22) 2 (1xdrdr/4 (xr) H+4/21) T(x)4(21) # 4 (xr) + 2 c.

+ (3, + 3, 3, ) = (dxdx'dadx) T (xx, xx) 4 (x) 4 (x) 7 (x) A & (xx) + h.c

+ (34 + 2343, +3,34 +353, -2343, +343, -23434 -23435) x

x \( \tag{\pi} \) \( 4 \tag{\pi} \) \( 4 \tag{\pi} \) \( \tag{

+ (34 +3431 +3134 -3434) [ (4xdradradxadxadxadxadxdx) of (xra) of (xra) And T(x) x (xr) x (xr

x = [dxdx,dz,dx,dx/dx/fx(xx,)]+x(xx,)+x(xx,)+x+ T(x)+(x)+(x)+x+ (xx,xx)+x+

+3434 = | dxd x, dz, dz, dz, dx, dx / dx / dx (xx,) & (x, x) Ax Ax T(x) & (x) 4(x) Ax & (x, x) x x \ \( \tau \) \ \( \tau \) \ \( \tau \) \ \( \tau \) \

 $-\left(35-31\overline{33}-235\overline{3}_{1}+35\overline{35}-35\overline{33}\right)\sum_{\alpha}\int dXdX_{1}dx_{1}dX_{2}dX_{1}dX_{2}dX_{3}dX_{4}dX_{5}$ 

 $+35 \sum_{\alpha} \int dx dx_{1} dx_{2} dx' dx' dx' dx' (x_{1}x_{1}) A_{x}^{\dagger} d^{\dagger}(x) T(x) d(x_{1}) d(x') d(x') P(x_{2}, x'2') + h.c.$   $+ \left(32 - 313_{1} + 23_{2} + 23_{1} + 23_{1} + 23_{2} +$ 

Pour laleuler T-1 Te T il suffit de remplacer les variables des protons dans T-1 Te par celles des electrons et miversement.

2) 
$$T^{-1}V_{pp}T = \int dx dx' T^{-1} + f(x)TT^{-1} + f(x')TV(xx')T^{-1} + f(x')TT^{-1} + f(x')T^{-1} + f($$

$$+ \frac{\left|3_{1}^{2}-3_{4}-23_{4}3_{1}+23_{4}3_{2}\right|^{2}}{c_{1}^{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left|d\chi d\chi' dz_{1}dz_{2} + \chi'(\chi z_{1})f_{\beta}^{+}(\chi' z_{2})A_{\gamma}^{+}A_{\beta}^{+}V(\chi \chi')\chi} \times A_{\gamma}A_{\gamma} + A_{\gamma}(\chi z_{1})f_{\gamma}(\chi' z_{2})A_{\gamma}^{+}A_{\beta}^{+}V(\chi \chi')\chi} \right|_{-\infty}^{\infty}$$

$$- \underbrace{\left| \frac{3^{2} - 3y - 23y3_{2} + 23y3_{2}}{C_{2}} \right|^{2}}_{X} \underbrace{\sum_{x \neq y \neq 0} \left| \frac{dx dx' dx_{1} dx_{2} \oint_{X}^{*} (X_{2}) \oint_{B}^{*} (X'_{2}) A_{x}^{\dagger} A_{y}^{\dagger} V(XX') x}_{X} \right|$$

$$C_{3} = \begin{cases} + \left[ 1 + \overline{j}_{3} + 4 \overline{j}_{1} - 2 \overline{j}_{3} \overline{j}_{1} - 2 \overline{j}_{3} \overline{j}_{2} - \overline{j}_{2} + 2 \left( -3 \overline{j}_{3} \overline{j}_{1} - \overline{j}_{2} + 2 \overline{j}_{2}^{2} - \overline{j}_{5} \overline{j}_{1} + 2 \overline{j}_{5} \overline{j}_{2} \right) + \\ + 2 \left( \overline{j}_{1}^{2} - \overline{j}_{4} - 2 \overline{j}_{4} \overline{j}_{1} + 2 \overline{j}_{4} \overline{j}_{2} \right) \left[ \left( 3 - \overline{j}_{4} - 2 \overline{j}_{4} \overline{j}_{1} + 2 \overline{j}_{4} \overline{j}_{2} \right) \times \\ \times \sum_{\alpha, \beta} \left[ d \chi d \chi' d z_{1} d z_{2} d \chi'' d \chi''' d \chi''$$

 $C_{5} = \begin{cases} + \left[ 2\overline{3}_{1} - 2\overline{3}_{2} - 3\overline{3}_{2}\overline{3}_{1} + 2\overline{3}_{2}^{2} - \overline{3}_{5}\overline{3}_{1} + 2\overline{3}_{5}\overline{3}_{2} + 2\overline{3}_{1}^{2} - 2\overline{3}_{4} - 4\overline{3}_{4}\overline{3}_{1} + 4\overline{3}_{4}\overline{3}_{2} \right] \times \\ \times \left( 3^{\frac{2}{1}} - 3_{4} - 2\overline{3}_{4}\overline{3}_{2} + 2\overline{3}_{4}\overline{3}_{2} \right) \end{cases}$ 

Pour obtenir l'expression de T-1 Vez T il suffit de remplacer dans T-1 Vpp T les variables des futons par celles des electrons et mirersement.

$$T^{-3}V_{pe}T = \int dY dx dY' dX'' dx'' dx'' \int_{-1}^{1} (x_{x}, x_{x}') dY'(x) dY'(x)$$

II-8

$$\frac{1}{24} \left[ \left( -\frac{2}{3} + \frac{2}{3} + \frac{2}{3}$$

+ 
$$\left[\frac{3535}{42}\frac{35337}{3531} + \left|\frac{35437}{3531} + \frac{3534}{3534}\right|^{2} + \left|\frac{3533}{3533}\right|^{2}\right] \times \sum_{\alpha \beta \gamma} \int d\chi d\gamma d\chi, d\chi, d\chi d\chi'.$$

$$+ \int_{\alpha}^{+} (\chi_{\pi}) d_{\mu}^{+} (\chi_{\pi} \chi_{\pi}) A_{\alpha}^{+} A_{\beta}^{+} V(\chi_{\pi}) d(\chi') d(\chi') A_{\gamma} d_{\gamma} (\chi_{\pi} \chi_{\pi}) \Gamma(\chi_{\pi}, \chi'_{2}) + h.c.$$

$$\begin{bmatrix}
-1 & \left[ \left( \frac{3}{3} \cdot \frac{3}{3} \cdot \frac{3}{3} \cdot \frac{3}{3} \cdot \frac{4}{3} \cdot 5 \right) - \left( -\frac{2}{3} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{3}{3} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{3}{3} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{3}{3} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{3}{3} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{3}{3} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{3}{3} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{3}{3} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{3}{3} \cdot$$

$$\left( + \left[ \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s - \left( \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right) \right] \left[ \left( \frac{3}{3}s - \frac{3}{3}s - \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right) \right] + \left[ \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \left( -\frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right) \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{2}{3}s \frac{3}{3}s - \left( \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right) \right] + \left[ \frac{2}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}{3}s \right] + \left[ \frac{3}{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}s + \frac{3}{3}s \frac{3}s + \frac{3}{3$$

$$\begin{array}{l}
+ \left\{ \left( -35 + 3531 + 3534 \right) + 3535 \right\} \left( -\overline{3}_{1} \right) + \left( 313_{3} - 353_{3} + 35 \right) \left[ \overline{3}_{1} + \left( \overline{3}_{5} + 353_{1} + 3534 \right) \right] + 353_{5} + 353_{1} + 353_{2} + 3$$

$$\frac{1}{\sqrt{16}} \left\{ \left[ \left( -\frac{2}{3} + \frac{2}{3} + \frac$$

$$b_{18} = \left\{ + \left[ \left( -\frac{2^{2}}{3^{4}} + \frac{3}{3}s_{3}^{2} + \frac{3}s_{3}^{2} + \frac{3}{3}s_{3}^{2} + \frac{3}{3}s_{3}^{2} + \frac{3}{3}s_{3}^$$

$$\frac{1}{621} \left( -\frac{3}{3} + \frac{3}{3} + \frac{3}{3} + \frac{3}{3} + \frac{3}{3} + \frac{3}{3} + \frac{3}{4} +$$

$$\begin{cases} + \left(3134 - 32 - 3234\right) \left[1 + 31 + \overline{3}y + 2\left(\overline{3}2 + 3134 - \overline{3}2 - \overline{3}234\right)\right] \\ + 31 \left[\overline{3}y + \left(\overline{3}1 + \overline{3}134 - \overline{3}2 - \overline{3}234\right)\right] \times \end{cases}$$

[ ] dxdzdz, dx'dz' \( \psi\_{\alpha}^{\*}(\chi\_{\alpha}) A\_{\alpha}^{+} 4^{+}(\alpha\_{\alpha}) \( \lambda\_{\alpha} \right) \( \lambda\_{\alpha} \right) \( \lambda\_{\alpha} \right) \\ \lambda\_{\alpha} \\ \lambd

On regroupe les termes qui ont la même structure et on trouve (37)

### BIBLIOGRAPHIE

- [1] M. GIRARDEAU, J. Math. Phys., vol. 16, N°9, 1975, p. 1901-1919.
- [2] M. GIRARDEAU, J. Math. Phys., Vol. 4, N°8, 1963, p. 1096-1115.
- [3] R. STOLT et W. BRITTIN, Phys. Rev., Vol. 27, N°9, p. 616-618.
- [4] A. Y. SAKAKURA, Phys. Rev. Lett., Vol. 27, N°12, p. 822-826.
- [5] T. NISHIGORI, Prog. Theor. Phys., Vol. 51, N°5, 1974, p. 1387-1405.
- [6] D. GILBERT, J. Math. Phys., Vol. 18, N°4, 1977, p. 791-805.
- [7] H.L. SAHLIN et J.L. SCHWARTZ, Phys. Rev., Vol. 138, N°1B, 1965, p. 267-273.
- [8] A. GOLDBERG et R.D. PUFF, Phys. Rev. Lett, Vol. 30, N°18, 1973, p. 869-872.
- [9] M. SCHEUNERT, W. NAHM et V. RITTENBERG, J. Math. Phys., Vol. 17, N°9, 1976, p. 1626-1639.
- [10] L. CORWIN, Y. NE'EMAN et S. STERNBERG, Rev. Moder. Phys., Vol. 47, N°3, 1975, p. 573-602.
- [11] F.A. BEREZIN et G.I. KAC, Mat. Sb, (U.S.S.R) 1982, p. 124 (English translation 1970, 11, 311).



Les diverses méthodes utilisées pour étudier les interactions entre particules, méthode de perturbation, méthode de Hartree-Fock ne les décrivent que d'une manière approchée.

Ce travail a été basé sur le formalisme mathématique des algèbres graduées, qui permet de construire l'algèbre des opérateurs d'un système de particules composées et libres en seconde quantification et d'obtenir toutes les relations de commutation et d'anticommutation qui caractérisent ce système et cela dans le cas physique d'un plasma d'hydrogène partiellement ionisé (cas non relativiste). Le choix de la transformation T qui laisse le sous espace pair de l'algèbre invariant permet d'avoir les opérateurs de champ des particules composées comme variables dynamiques du système et donc d'obtenir un hamiltonien qui contient tous les hamiltoniens des processus pouvant se produire entre les atomes, les électrons et les protons (processus d'ionisation, de recombinaison, etc...).

### MOTS CLEFS :

- Algèbre de Lie graduée
- Seconde quantification