DENSITÉ DE NIVEAUX À UNE PARTICULE DANS LES SYSTÈMES OUVERTS



Simon MOULIERAS Parcours de Physique Quantique

> Sous la direction de : Patricio LEBOEUF

Laboratoire de Physique Théorique et Modèles Statistiques

7 janvier - 25 avril 2008

Remerciements

Je tiens, en premier lieu, à remercier Patricio Leboeuf qui a accepté de m'encadrer durant ce stage, pour ses conseils avisés, et riches en physique. Je remercie également Alejandro Monastra pour sa collaboration précieuse, aussi j'espère que cette dernière s'approfondira durant ma thèse. Je remercie Nicolas Pavloff et Denis Ullmo qui m'ont fréquemment aidé, ainsi que Xavier Campi, qui a gentillement accepté de me prêter un coin de son bureau.

Merci beaucoup à Mathias Albert qui m'a énormément soutenu dans mon travail. Bien sûr, je remercie l'ensemble des doctorants du LPTMS qui m'ont très chaleureusement accueilli : My dear David, Brice, Jérôme, Pierre entre autres. Merci aussi à Evgeny pour les pauses clopes.

Je remercie également Rhita, Samir (2m24!), François, pour leur soutien et leur agréable compagnie. Enfin, un grand Merci à Bertrand, Will, Alice, John, Billy, Chris ...

Table des matières

Présentation du LPTMS // Introduction //		7
		9
1	Théorie élémentaire de la densité de niveaux	10
	1.1 Motivations	10
	1.2 Formalisme général	10
	1.2.1 Lien avec la fonction de partition	10
	1.2.2 Lien avec la fonction de Green	11
	1.3 Théorie semi-classique	12
	1.3.1 L'exemple de l'oscillateur harmonique	12
	1.3.2 Generalisation aux systèmes ne dependant que d'un nombre quantique	12
	1.3.3 Formule de Weyl	13
	1.4 Conclusion \ldots	14
2	Le modèle de Thomas-Fermi	15
	2.1 Le développement de Wigner-Kirkwood	15
	2.2 Densité de Thomas-Fermi Etendu (ou densité ETF) à température nulle	16
3	Applications aux systèmes ouverts	17
	3.1 Discussion préliminaire	17
	3.2 La formulation opératorielle du modèle ETF	18
	3.3 Calcul des corrections pour le puits carré de profondeur finie	18
	3.4 Interprétations	21
	3.5 Résultats numériques	22
	3.5.1 Puits carré (1 dimension) \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	22
	3.5.2 Puits sphérique (3 dimensions) $\ldots \ldots \ldots$	24
	3.5.3 Interprétation des résultats numériques	25
Co	Conclusion et perspectives	
\mathbf{A}	Annexe 1 : Quantification de Bohr-Sommerfeld	
\mathbf{A}	Annexe 2 : Formule de Poisson	
\mathbf{A}	Annexe 3 : Formule de Weyl	
\mathbf{A}	Annexe 4 : Densité de niveaux de l'oscillateur harmonique	
Bibliographie		36

Présentation du LPTMS

Le Laboratoire de Physique Théorique et Modèles Statistiques (LPTMS) est une unité mixte de recherche CNRS-Université Paris 11. Créé en 1998, il rassemble une vingtaine de chercheurs et enseignants-chercheurs permanents. Les thématiques sont centrées autour de la physique statistique avec des ouvertures vers la physique de la matière condensée.

Chaos et systèmes quantiques : théorie des phénomènes quantiques en présence de chaos. Fluctuations spectrales, théorie des matrices et polynômes aléatoires. Méthodes semiclassiques, formules des traces, fonctions zéta. Effet tunnel, diffraction. Applications à la physique mésoscopique, aux agrégats métalliques et à la physique nucléaire. Physique statistique des systèmes en basse dimension : Modèle des anyons. Statistique de Haldane. Systèmes désordonnés : propriétés de transport et de localisation, applications à l'effet Hall quantique. Groupe des tresses. Matrices aléatoires et mouvement Brownien. Mécanique quantique sur des graphes.

Fluides classiques : amas dans les fluides denses, lignes de percolation dans les fluides supercritiques. Application à la fragmentation de systèmes de taille finie.

Fluides quantiques : condensation de Bose dans les gaz dilués. Laser atomique. Agrégats métalliques : facetage, effets de rugosité, fluctuation de la réponse mécanique. Systèmes d'hélium (hélium 4 et hélium 3) inhomogènes : films minces, propriétés de mouillage, hélium liquide à pression negative.

Systèmes désordonnés : verres de spins, verres structuraux : thermodynamique et relaxation hors d'équilibre ; nature des excitations de basse énergie. Physique statistique des problèmes d'optimisation combinatoire. Agents en interactions, applications à des modélisations de problèmes économiques.

Biophysique : étirement et mouvement Brownien des biomolécules, ADN double brin ou simple brin, ARN.

Physique des solides des systèmes en basse dimension : théorie des phénomènes électroniques dans les matériaux spéciaux, systèmes de basse dimensionalité : conducteurs synthétiques (supraconducteurs organiques, polymères dopés, composantes aux chaînes). Propriétés des superstructures : ondes de densité de charge et de spin, cristallisation électronique, réseaux de vortex dans l'état supraconducteur, "stripe phases" dans les supraconducteurs à haute température critique. Applications aux polymères : activité optique et électronique.

Physique mésoscopique : microstructures électroniques balistiques, magnétisme orbital, blocage de Coulomb, bruit de grenaille dans les liquides de Hall quantiques, fluctuations dans les gaz de Fermi.

Théorie statistiques des champs et modèles integrables : théorie conforme des champs. Propriétés critiques de modèles désordonnés. Modèle de Potts. Ansatz de Bethe. Matrices aléatoires.

Introduction

Le thème du chaos a été abordé pour la première fois en Physique au début du XX^{ème} siècle par Poincaré, avant d'être laissé en friche jusqu'aux années 60 (i.e. jusqu'à l'arrivée des ordinateurs), pendant lesquelles le chaos à suscité beaucoup d'intérêt. Le chaos a une acceptation bien précise en physique : il concerne les systèmes dont la dynamique présente à la fois une forte récurrence, et une sensibilité extrême aux conditions initiales. La mécanique quantique pose le problème suivant : Quel serait le comportement d'un système dont la dynamique classique serait chaotique, dans le cadre de la mécanique quantique? En effet, bien que la notion de condition initiale soit univoque en mécanique classique, en mécanique quantique, elle est obscurcie par la relation d'incertitude d'Heisenberg. De plus, la notion de trajectoire n'existe plus, et est remplacée par celle d'amplitude de probabilité. L'étude de ce problème est appelé le "chaos quantique".

Un outil récurrent dans l'étude des systèmes chaotiques est la densité de niveaux : $\rho(E)$. Par exemple, dans un billard chaotique, bien que le spectre soit extrêmement difficile à déterminer, il est possible d'obtenir un développement en formel de la densité de niveaux. L'obtention de la densité de niveaux, étant équivalente à celle du spectre, est très précieuse. En mécanique quantique, cette démarche est généralisable à tous les systèmes fermés. Dans ce cas, on peut décomposer la densité de niveaux en la somme d'une partie lisse : $\bar{\rho}(E)$ et d'une partie fluctuante : $\tilde{\rho}(E)$ et les déterminer formellement. La partie lisse est donnée par des propriétés globales du système : le volume du domaine, son aire ... La partie fluctuante, quant à elle, est déterminée grâce aux orbites périodiques classiques du système. Une présentation sommaire du formalisme de la densité de niveaux fera l'objet de la première partie de ce rapport.

On s'est ensuite intéressé aux modifications à apporter et à la validité de la théorie existante dans le cadre des systèmes ouverts (i.e. les systèmes dont le spectre est un continuum). Dans ce cas, on ne recherche non plus la densité de niveaux, mais la densité des parties réelles des résonances dans le continuum. Nous allons, dans ce stage, nous intéresser surtout aux systèmes semi-ouverts qui sont, comme par exemple le puits carré fini à une dimension, des systèmes qui possèdent une partie liée avec un spectre discret réel, et une partie ouverte, caractérisée par des résonances. Un nombre important de questions se posent concernant ce spectre : dépendance en énergie de la densité des parties réelles des résonances, effets de couches (fluctuations) dans cette densité, etc ... Le but de ce stage est d'étudier les corrections de la partie lisse de la densité de niveaux du spectre réel, à la présence du continuum. La méthode dite de *Llewellyn Thomas* et *Enrico Fermi* a été construite pour donner des corrections quantiques à la formule de la partie lisse de densité de niveaux, toutefois ces corrections ne sont pas particulièrement adaptées aux systèmes ouverts. Dans la deuxiéme partie, nous étudierons ce modèle. Enfin, la dernière partie de ce rapport sera consacrée à l'adaptation de la méthode de Thomas-Fermi dans l'optique d'une correction de la partie lisse aux systèmes ouverts.

1 Théorie élémentaire de la densité de niveaux

1.1 Motivations

La densité de niveaux et une des grandeurs de base de tout système quantique et sa détermination est capitale pour déterminer les propriétés physiques d'un système (par exemple, en physique nucléaire quand il s'agit de calculer des taux de transition). De plus, c'est une grandeur capitale en physique expérimentale, puisqu'on peut la mesurer directement. La détermination formelle de la partie lisse de la densité de niveaux a beaucoup été utilisée, notamment pour la physique nucléaire, les modèles d'électrons dans les métaux, le rayonnement du corps noir, etc ... Enfin, nous allons voir plus loin (1.2.1) que la fonction de partition est directement déductible de la densité de niveaux (et vice-versa); cette dernière est donc au cœur de la compréhension de n'importe quel système, à une ou plusieurs particules, en intéractions ou pas.

1.2 Formalisme général

Considérons l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle, \quad \text{soit} \quad \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)\Psi_n(r) = E_n\cdot\Psi_n(r)$$
(1)

où l'ensemble des $\{E_n\}_{n\geq 0}$ désigne le spectre du système. La définition de la densité de niveaux $\rho(E)$ est la suivante :

$$\rho(E) = \sum_{n \ge 0} \delta(E - E_n) \tag{2}$$

où δ désigne la distribution de Dirac. On définit à présent la *densité d'états cumulée*, aussi appelée fonction de comptage, N(E), par :

$$N(E) = \int_0^E \rho(E') dE' \tag{3}$$

On a donc :

$$N(E) = \sum_{n \ge 0} \Theta(E - E_n) \tag{4}$$

où Θ désigne la distribution de Heaviside.

1.2.1 Lien avec la fonction de partition

Nous pouvons facilement relier ρ à la fonction de partition Z :

$$Z(\beta) = \sum_{n \ge 0} e^{-\beta E_n} = \sum_{n \ge 0} \int_0^{+\infty} e^{-\beta E} \delta(E - E_n) dE = \int_0^{+\infty} \rho(E) e^{-\beta E} dE$$
(5)

On obtient donc que la fonction de partition canonique est la transformée de Laplace de la densité de niveaux. En Physique Statistique ainsi qu'en Thermodynamique, β désigne l'inverse de la température. Dans notre contexte, il n'est qu'une variable mathématique complexe permettant l'évaluation de la continuation analytique de la fonction de partition $Z(\beta)$. En réalité, on ne se

servira pas de cette formule, mais plutôt de sa réciproque, à savoir du fait que la densité de niveaux est la transformée de Laplace inverse de la fonction de partition :

$$\rho(E) = \mathcal{L}_E^{-1}(Z(\beta)) = \frac{1}{2i\pi} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} Z(\beta) e^{\beta E} d\beta$$
(6)

Ici, le paramètre a doit être pris strictement positif, et suffisamment grand pour laisser *tous* les pôles de l'intégrant à gauche de la droite d'intégration. Donc, si la fonction de partition ne possède qu'un nombre fini de pôles, le calcul de la densité de niveaux se ramène à un simple calcul de transformée de la Laplace inverse. Nous en verrons un exemple plus tard.

1.2.2 Lien avec la fonction de Green

Soit K(r, r', t - t') le propagateur de Feynman associé au problème de Schrödinger (1). Sa définition est la suivante :

$$K(r, r', t - t') = \langle r | e^{\frac{-i}{\hbar} H(t - t')} | r' \rangle$$
(7)

que l'on peut développer sur la base des états propres de \hat{H} , ce qui donne :

$$K(r, r', t - t') = \sum_{n} \Psi_{n}^{*}(r')\Psi_{n}(r)e^{\frac{-i}{\hbar}E_{n}(t - t')}$$
(8)

On peut aussi relier la densité de niveaux à la fonction de Green du système G(r, r', E) qui est définie par la transformée de Fourier (sur les temps positifs par causalité) du propagateur K(r, r', t):

$$G(r, r', E) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty K(r, r', t) e^{\frac{iEt}{\hbar}}$$
(9)

que l'on peut, comme pour K, projeter sur la base des états propres du Hamiltonien :

$$G(r, r', E) = \sum_{n} \Psi_{n}^{*}(r')\Psi_{n}(r)\frac{1}{E - E_{n}}$$
(10)

Alors, la trace de G(r, r', E) donne :

$$Tr(G) = \int G(r, r, E) d^3r = \sum_n \frac{1}{E - En}$$
(11)

A présent, nous utilisons l'identité

$$\frac{1}{E+i\epsilon-E_n} = \mathcal{P}\mathcal{P}\frac{1}{E-E_n} - i\pi\delta(E-E_n) \qquad (\epsilon > 0)$$
(12)

pour conclure que

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{I}m(Tr(G(r, r', E + i\epsilon))) \qquad (\epsilon > 0)$$
(13)

Nous obtenons ici une seconde formule compacte et exacte de la densité de niveaux. L'avantage de cette dernière est qu'il n'y a aucun besoin d'avoir des informations sur le spectre, pour calculer la densité de niveaux.

1.3 Théorie semi-classique

Dans cette section, nous donnons quelques applications des formules données précédemment et nous discutons des approximations que nous pourrons faire concernant la densité de niveaux.

1.3.1 L'exemple de l'oscillateur harmonique

Considérons un oscillateur harmonique à une dimension : $\hat{H} = \hbar \omega (\hat{N} + \frac{1}{2})$. La fonction de partition s'écrit :

$$Z(\beta) = \sum_{n} e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} = \frac{1}{2\sinh\left(\beta\hbar\omega/2\right)}$$
(14)

Nous allons maintenant calculer la transformée de Laplace inverse de cette fonction de partition. Les pôles de la fonction $\frac{1}{\sinh(z)}$ sont tous des pôles simples et sont tous situés sur l'axe des imaginaires purs. Le contour d'intégration sera dont le demi-cercle infini de droite. Le développement en série de Laurent de cette dernière est :

$$\frac{1}{\sinh(z)} = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \frac{(-1)^k}{z - ik\pi}$$
(15)

Le résidus de $Z(\beta)e^{\beta E}$ associé à un pôle $\beta_k = \frac{2ik\pi}{\hbar\omega}$ est $r_k = \frac{2i\pi}{\hbar\omega}(-1)^k e^{\beta_k E}$ ce qui donne, par le théorème des résidus que :

$$\rho(E) = \frac{1}{\hbar\omega} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} (-1)^k e^{\frac{2ik\pi E}{\hbar\omega}} = \frac{1}{\hbar\omega} \left(1 + 2\sum_{k=1}^{+\infty} (-1)^k \cos\left(\frac{2k\pi E}{\hbar\omega}\right) \right)$$
(16)

Ici, nous voyons apparaître spontanément $\rho(E)$ comme une somme d'une partie lisse $\frac{1}{\hbar\omega}$ et d'une partie fluctuante $\frac{2}{\hbar\omega} \sum_{k=1}^{+\infty} (-1)^k \cos\left(\frac{2k\pi E}{\hbar\omega}\right)$, comme annoncé plus tôt. On constate donc l'*utilité* des formules démontrées dans la section 1.2. On peut donner une interprétation de cette formule : la partie lisse $\frac{1}{\hbar\omega}$ signifie qu'en moyenne, les niveaux sont uniformément répartis sur l'axe des énergies (ce qui est bien le résultat attendu pour l'oscillateur harmonique). D'autre part, l'argument des cos : $\frac{2k\pi E}{\hbar\omega}$ peut s'interpréter comme étant le rapport de l'action classique des orbites périodiques d'énergie E oscillant k fois, et \hbar (voir Annexe 1). De plus, nous pouvons constater que la série de cosinus converge bien vers une série de pics δ en Annexe 4.

1.3.2 Généralisation aux systèmes ne dépendant que d'un nombre quantique

Dans cette section, nous allons généraliser la méthode utilisée pour obtenir la densité de niveaux de l'oscillateur harmonique à n'importe quel système possédant un seul nombre quantique. Nous considérons un spectre discret E_n indexé par $n \ge 0$ et chaque niveau n est dégénéré d_n fois.

$$E_n = f(n), \quad d_n = D(n), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$
 (17)

où f est une fonction monotone arbitraire dont l'inverse F est dérivable, de telle manière que $n = F(E_n)$, et où D est une autre fonction arbitraire. Alors, en utilisant les propriétés générales de la fonction δ , nous avons :

$$\delta(E - E_n) = \delta(E - f(n)) = |F'(E)|\delta(n - F(E))$$
(18)

Nous obtenons donc, en remplaçant dans l'expression générale de la densité de niveaux :

$$\rho(E) = D(E)|F'(E)| \sum_{n=0}^{+\infty} \delta(n - F(E))$$
(19)

Or, d'après la formule de Poisson (Annexe 2), on peut réécrire finalement la densité de niveaux sous la forme suivante :

$$\rho(E) = D(E)|F'(E)|(1+2\sum_{k=1}^{+\infty}\cos(2k\pi F(E)))$$
(20)

Nous constatons bien l'apparition d'une partie lisse et d'une partie fluctuante, tout comme pour l'oscillateur harmonique.

1.3.3 Formule de Weyl

Nous allons, dans un premier temps, démontrer la formule de Thomas-Fermi, qui est une approximation haute température de la partie lisse de la densité de niveaux d'un système arbitraire. Puis, nous allons en déduire la formule de Weyl, qui est l'application de Thomas-Fermi à un billard (de n'importe quelle dimension). Cette section est donc capitale pour la compréhension du travail réalisé en stage. Notons tout d'abord que jusqu'ici, aucune approximation n'a été faite. Les formules (6) et (13) donnent la densité de niveaux exacte à partir de la fonction de partition et de la fonction de Green respectivement.

Nous nous plaçons ici en dimension D. La fonction de partition est :

$$Z(\beta) = Tr(e^{-\beta\hat{H}}) = \int d^D p \langle p | e^{-\beta\hat{H}} | p \rangle \neq \int d^D p \langle p | e^{-\beta\frac{\hat{p}^2}{2m}} e^{-\beta V(\hat{r})} | p \rangle$$
(21)

En revanche, le membre droite de l'équation (21) est le premier terme d'un développement en série où $\beta \to 0$, c'est à dire à haute température. En insérant une relation de fermeture en espace $\int d^D q |q\rangle \langle q|$ dans l'intégrale, nous obtenons :

$$Z(\beta) \approx Z_{cl}(\beta) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int d^D p \int d^D q e^{-\beta H_{cl}(p,q)}$$
(22)

où $H_{cl}(p,q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$. L'approximation faite ici signifie que l'on considère le système comme "classique" puisqu'on a considéré nul le commutateur $[\hat{p}, \hat{r}]$, toutefois, nous n'avons pas dit $\hbar = 0$ non plus. Nous somme donc dans un régime intermédiaire entre classique et quantique. C'est l'approximation *semi-classique*. Dans le cadre de cette approximation, la transformée de Laplace inverse de $Z(\beta)$ peut être prise facilement à l'aide du "théorème du retard". Cela donne la Formule de Thomas-Fermi :

$$\rho_{TF}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int d^D p \int d^D q \delta(E - H_{cl}(p,q))$$
(23)

Cette règle est bien connue et symbolise le fait que dans l'espace des phases classique, un état quantique occupe en moyenne un volume égal à h^D . Appliquons cette règle à un billard 3D. L'intégrale sur l'espace donne immédiatement le volume V du billard, et l'intégrale sur les impulsions est un calcul de la surface de l'hypersphère en dimension D. A 3 dimensions, le calcul donne :

$$\rho(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E}$$
(24)

De même, à 1 et 2 dimensions, on obtient des formules similaires :

$$\rho^{3D}(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E}$$
(25)

$$\rho^{2D}(E) = \frac{S}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \tag{26}$$

$$\rho^{1D}(E) = \frac{L}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{E}}$$
(27)

Il faut rappeler ici que ces formules sont des approximations. De plus, elles ne contiennent aucune information sur la partie oscillante. En effet, la formule de Weyl donne le terme dominant dans un développement haute énergie de la partie lisse de la densité de niveaux. A une dimension, la formule donnée ci-dessus donne la valeur exacte de la partie lisse, toutefois, à 2 et 3 dimensions, il y a des corrections à la partie lisse dues aux effets de surface et de courbure. Nous calculons par exemple la correction de surface de la partie lisse à 3 dimensions dans l'Annexe 3. Pour des billards (à bords lisses), les formules de Weyl sont les suivantes :

$$\bar{\rho}^{3D}(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E} - \frac{S}{16\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) + \frac{\mathcal{L}}{16\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{E}} + \dots \bar{\rho}^{2D}(E) = \frac{S}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) - \frac{P}{8\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{E}} + \dots \bar{\rho}^{1D}(E) = \frac{L}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{E}}$$
(28)

Dans ces dernières équations, V, S, et P représentent respectivement les volume, surface, et périmètre des billards. L est la taille du billard à une dimension. La valeur \mathcal{L} est en fait une longueur caractérisant la courbure de la cavité. Le traitement de ce terme est donné dans un article de R. Balian & C. Bloch¹ de 1970.

1.4 Conclusion

Nous avons vu dans cette première partie le formalisme général de la densité de niveaux : les formules les plus utiles pour calculer des densités de niveaux, quelques exemples simples, mais également la *formule de Weyl* qui donne le ou les ordres dominants de la partie lisse de la densité de niveaux d'un billard. Nous allons à présent tenter de comprendre comment on peut, sans tenir compte des fluctuations, corriger l'approximation faite dans la formule de Thomas-Fermi, pour étudier les systèmes ouverts. Dans un premier temps, nous allons voir dans quelle mesure le modèle étendu de Thomas-Fermi (ETF ou Extended Thomas Fermi Model) apporte des corrections à la formule de Weyl. Puis nous verrons si cela peut convenir aux systèmes ouverts.

¹Annals Of Physics : **60**, 401-447 (1970)

2 Le modèle de Thomas-Fermi

L'approximation dans la dérivation de la formule de Thomas Fermi est faite lorsqu'on suppose le commutateur $[\hat{p}, \hat{r}]$ nul. Le modèle étendu de Thomas-Fermi, au travers du développement de Wigner-Kirkwood, affine cette approximation.

2.1 Le développement de Wigner-Kirkwood

Considérons une particule quantique plongée dans un potentiel $V(\hat{r})$. On reprend la démarche de la section 1.3.3, sans faire l'approximation semi-classique. Pour écrire la fonction de partition, nous allons effectuer la trace de l'opérateur $e^{-\beta \hat{H}}$ sur la base des ondes planes :

$$Z(\beta) = \frac{1}{h^D} \int d^3r \int d^3p e^{-i\frac{p\cdot r}{\hbar}} e^{-\beta\hat{H}_r} e^{i\frac{p\cdot r}{\hbar}}$$
(29)

où l'on peut écrire l'opérateur \hat{H}_r comme $\hat{H}_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\Delta}_r + V(\hat{r})$. Comme vu précédemment, les opérateurs d'énergie cinétique $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ et de potentiel $V(\hat{r})$ ne commutent pas. Nous allons donc introduire fonction $w(r, p, \beta)$ corrigeant cette non-commutation :

$$e^{-\beta\hat{H}_r}e^{i\frac{p\cdot r}{\hbar}} = e^{-\beta H_{cl}(r,p)}e^{i\frac{p\cdot r}{\hbar}}w(r,p,\beta) = u(r,p,\beta)$$
(30)

Ainsi, la fonction de partition peut s'exprimer sous la forme :

$$Z(\beta) = \frac{1}{h^D} \int d^3r \int d^3p e^{-\beta H_{cl}(r,p)} w(r,p,\beta)$$
(31)

Nous allons à présent déterminer $w(r, p, \beta)$ grâce aux règles de la mécanique quantique qui affirment que $u(r, p, \beta)$ vérifie l'équation suivante :

$$\frac{\partial u}{\partial \beta} + \hat{H}u = 0 \tag{32}$$

avec la condition limite suivante :

$$\lim_{\beta \to 0} u = e^{i\frac{p \cdot r}{\hbar}}.$$
(33)

En insérant la définition de u dans l'équation différentielle (31), nous obtenons une équation différentielle sur w:

$$\frac{\partial w}{\partial \beta} = -i\hbar \left[\frac{\beta}{m} (p \cdot \nabla V) w - \frac{1}{m} (p \cdot \nabla w) \right] + \frac{\hbar^2}{2m} \left[\beta^2 (\nabla V)^2 w - \beta (\Delta V) w + \Delta w - 2\beta (\nabla V \cdot \nabla w) \right]$$
(34)

et la condition limite portant sur w est :

$$\lim_{\beta \to 0} w = 1 \tag{35}$$

Pour le moment, aucune approximation n'a été faite. Cette formule est parfaitement exacte à partir du moment où le potentiel V est suffisamment régulier pour que son gradient et son lapacien existent. Nous allons à présent faire un développement de w en puissances de \hbar :

$$w = 1 + \hbar w_1 + \hbar^2 w_2 + \dots$$
 (36)

Que l'on insère dans l'équation différentielle (34) pour trouver les différents w_n en résolvant l'équation en ordre \hbar^n . On trouve relativement facilement que :

$$w_1 = -\frac{i\beta^2}{2m}p \cdot \nabla V \tag{37}$$

$$w_2 = -\frac{\beta^2}{4m}\nabla^2 V + \frac{\beta^3}{6m}(\nabla V)^2 - \frac{\beta^4}{8m^2}(p \cdot \nabla V)^2 + \frac{\beta^3}{6m^2}(p \cdot \nabla)^2 V$$
(38)

La fonction de partition se développe alors de la manière suivante :

$$Z(\beta) = \frac{1}{h^D} \int d^3r \int d^3p e^{-\beta H_{cl}(r,p)} (1 + \hbar w_1 + \hbar^2 w_2 + \dots)$$
(39)

Ce développement est appelé *développement de Wigner - Kirkwood*. Dans la section qui suit, nous allons prendre la transformée de Laplace inverse pour retrouver la densité de niveaux, selon ce développement.

2.2 Densité de Thomas-Fermi Etendu (ou densité ETF) à température nulle

Le modèle "standard" de Thomas-Fermi donne l'ordre 0 en \hbar de la densité de niveaux, c'est à dire qu'il revient à remplacer w par 1 dans son développement, et l'on retrouve l'ordre dominant : la formule de Thomas-Fermi donnée en (23). Le modèle de Thomas-Fermi Etendu (Extended Thomas-Fermi model) apporte des corrections à ces formules. Il s'agit, maintenant que nous avons une expression de la fonction de partition, de prendre la transformée de Laplace inverse. Nous rappelons les formules de transformée de Laplace inverse utiles dans ce calcul :

$$\mathcal{L}_{E}^{-1}\left[\frac{e^{-\beta V(r)}}{\beta^{\nu}}\right] = \frac{(E - V(r))^{\nu - 1}}{\Gamma(\nu)}\Theta(E - V(r))$$
(40)

 et

$$\mathcal{L}_{E}^{-1}[\beta^{n}Z(\beta)] = \frac{\partial^{n}}{\partial E^{n}} \mathcal{L}_{E}^{-1}[Z(\beta)].$$
(41)

En dimension 3, on obtient donc la densité de niveaux ETF à l'ordre 2 suivante :

$$\rho_{ETF}^{3D}(E) = \rho_{TF}^{3D}(E) - \frac{1}{96\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial E} \int d^3 r \Theta(E - V(r)) \frac{\nabla^2 V}{(E - V(r))^{1/2}} + \dots$$
(42)

Aux dimensions inférieures, les corrections sont semblables. Nous avons à présent réussi à obtenir une correction de la formule de Weyl.

L'équation (42) souligne plusieurs éléments importants, quant à l'application de ce modèle : D'abord, ces corrections ne sont valables que pour des potentiels suffisamment dérivables. De plus, la correction se présente sous la forme d'une intégrale donc le domaine d'intégration est tel que le potentiel doit rester inférieur à l'énergie. Nous devons donc maintenant essayer de valider, ou pas, la correction apportée par le modèle ETF, appliquée aux systèmes ouverts.

3 Applications aux systèmes ouverts

3.1 Discussion préliminaire

Le système ouvert que nous visons à étudier est le puits sphérique (à 3 dimensions, de profondeur finie V_0). Pour nous familiariser avec la méthode, nous allons d'abord essayer de traiter un système ouvert plus simple : le puits carré à 1 dimension, de profondeur finie V_0 et de taille L. Evidemment, le potentiel étant très singulier au bords, le développement ETF ne convient pas pour cet exemple. Nous devrions donc prendre un potentiel "doux", du type Woods-Saxon², calculer le terme ETF de la densité de niveaux, et faire tendre le paramètre k vers l'infini, afin de récupérer une correction pour le puits carré. En réalité, les calculs que j'ai mené dans cette optique ne mènent qu'à une formule dans laquelle les divergences disparues dans un premier temps, reviennent lorsque l'on fait tendre $k \to +\infty$.

Regardons ici ce que corrige, ou pas, le développement ETF : Donnons un exemple : pour le puits sphérique fini, à 3 dimensions, le potentiel étant constant à l'intérieur du puits, la formule (42) ne donne pas de correction au terme de Thomas-Fermi. En fait, on peut remarquer que le développement de ETF ne tient pas compte du fait que la profondeur du puits soit finie. Egalement, dans l'intégrale (42), on corrige des effets dûs à la courbure du potentiel, mais pas à sa taille. De plus, l'intégrale ne porte que sur le domaine où $V(r) \leq E$, or, dans un puits de profondeur finie, la différence essentielle avec un puits de profondeur infinie, est le fait que les fonctions d'ondes peuvent pénétrer dans la zone classiquement "interdite". Donc le volume moyen occupé n'est plus fixe en fonction de l'énergie, et ce phénomène n'est pas décrit dans les formules du modèle ETF. Dans cette dernière partie, nous allons utiliser cette remarque pour essayer de trouver une correction à la partie lisse de la densité de niveaux satisfaisante pour le puits carré et le puits sphérique, de profondeurs finies.

Constatons ici plusieurs choses : Que l'on prenne un puits carré de profondeur finie (système ouvert) ou infinie (système fermé), le potentiel est singulier aux bords et donc, le modèle ETF ne convient pas à ce genre de problèmes. D'autre part, les fonctions $\Theta(E - V(r))$ présentes dans la formulation ETF, empêchent la méthode de tenir compte de l'effet tunnel, quel que soit le type de système. Nous soulignons ici que ce sont des problèmes intrinsèques au développement ETF (qui a été construit dans le cadre de l'étude des systèmes fermés), et pas dus au fait que l'on essaye de l'employer aux systèmes ouverts.

D'autre part, notre but est tout de même de s'intéresser aux systèmes ouverts, et en particulier, à leur formulation la plus simple, à savoir le puits carré (ou sphérique) de profondeur finie. Nous allons donc devoir faire face à ces problèmes. De plus, contrairement aux systèmes fermés, l'effet tunnel devient de plus en plus important dans les systèmes ouverts, lorsque l'on se rapproche du continuum. Nous allons essayer dans la section qui suit, de reformuler la méthode ETF, afin qu'elle soit plus adaptée aux problèmes auxquels nous nous intéressons.

 $^{{}^{2}}V_{Woods-Saxon}(r) = \frac{V_{0}}{1 + \exp{-k(|r| - L/2)}}$. Ce potentiel tend vers un puits carré lorsque $k \to +\infty$.

3.2 La formulation opératorielle du modèle ETF

Reprenons le début de la développement de Wigner-Kirkwood. Nous écrivons $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ où $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ est l'opérateur d'énergie cinétique. La fonction de partition s'écrit :

$$Z(\beta) = Tr(e^{-\beta(T+V)}) \tag{43}$$

Or le développement de Wigner-Kirkwood consiste à calculer cette trace sur la base des ondes planes, puis de déterminer $w(r, p, \beta)$ par un développement semi-classique. Ceci reviendrait, d'un point de vue opératoriel (donc plus formel) à écrire que :

$$e^{-\beta(\hat{T}+\hat{V})} = e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{T}}\hat{W}$$

$$\tag{44}$$

ou encore

$$\hat{W} = e^{\beta \hat{T}} e^{\beta \hat{V}} e^{-\beta(\hat{T}+\hat{V})} \tag{45}$$

où l'opérateur \hat{W} contient la correction venant de la non-commutation des opérateurs \hat{T} et \hat{V} . Si on développe maintenant les exponentielles d'opérateurs en série de puissances de β , on obtient, à l'ordre 1 :

$$\hat{W} = (1 + \beta \hat{T})(1 + \beta \hat{V})(1 - \beta (\hat{T} + \hat{V})) = 1 + \mathcal{O}(\beta^2)$$
(46)

On obtient un premier ordre nul, tout comme pour le modèle ETF original. De la même manière, l'ordre 2 donne :

$$\hat{W} = (1 + \beta \hat{T} + \frac{\beta^2}{2} \hat{T}^2) (1 + \beta \hat{V} + \frac{\beta^2}{2} \hat{V}^2) (1 - \beta (\hat{T} + \hat{V}) + \frac{\beta^2}{2} (\hat{T} + \hat{V})^2)$$
(47)

$$\hat{W} = 1 + \frac{\beta^2}{2} [\hat{T}, \hat{V}] + \mathcal{O}(\beta^3)$$
(48)

Nous avons trouvé le premier ordre non-nul de \hat{W} . La première correction à $Z(\beta)$ est donc :

$$Z(\beta) = Z_{cl}(\beta) + \frac{\beta^2}{2} Tr(e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{T}}[\hat{T},\hat{V}]) + \mathcal{O}(\beta^3)$$

$$\tag{49}$$

L'avantage de cette méthode apparaît maintenant, car il nous appartient ici de choisir la base qui convient pour calculer la trace.

3.3 Calcul des corrections pour le puits carré de profondeur finie

Nous allons appliquer la formule(49) au puits carré, pour lequel le potentiel vaut $-V_0$ dans le puits, c'est à dire pour |x| < L/2, et 0 ailleurs. Calculons séparément les 2 traces du commutateur de l'expression (49). Commençons par le terme en $\hat{T}\hat{V}$ qu'il convient de projeter sur une base d'espace :

$$Tr(e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{T}}\hat{T}\hat{V}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x|e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{T}}\hat{T}\hat{V}|x\rangle$$
(50)

$$= -V_0 e^{\beta V_0} \int_{-L/2}^{+L/2} dx \langle x | e^{-\beta \hat{T}} \hat{T} | x \rangle$$
(51)

On insère ici une relation de fermeture en $p : \int dp |p\rangle \langle p| = \hat{1}$, et on obtient simplement :

$$Tr(e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{T}}\hat{T}\hat{V}) = -\frac{LV_0e^{\beta V_0}}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dp \frac{p^2}{2m} e^{-\beta\frac{p^2}{2m}}$$
(52)

que l'on calcule aisément :

$$Tr(e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{T}}\hat{T}\hat{V}) = -\frac{V_0 e^{\beta V_0}}{4\sqrt{\pi}\beta^{3/2}} \left(\frac{2mL^2}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$
(53)

Le second terme, en $\hat{V}\hat{T}$ est un peu plus difficile à obtenir. Il convient, en premier lieu, de permuter les opérateurs la trace afin d'obtenir un opérateur \hat{V} à l'une des extrémités. Ainsi, on a :

$$Tr(e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{T}}\hat{V}\hat{T}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \langle x_1 | \hat{V}\hat{T}e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{T}} | x_1 \rangle$$
(54)

$$= -V_0 \int_{-L/2}^{+L/2} dx_1 \langle x_1 | \hat{T} e^{-\beta \hat{V}} e^{-\beta \hat{T}} | x_1 \rangle$$
 (55)

On insère maintenant une relation de fermeture en x_2 :

$$Tr(e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{T}}\hat{V}\hat{T}) = -V_0 e^{\beta V_0} \int_{-L/2}^{+L/2} dx_1 \int_{-L/2}^{+L/2} dx_2 \langle x_1 | \hat{T} | x_2 \rangle \langle x_2 | e^{-\beta\hat{T}} | x_1 \rangle$$
(56)

$$- V_0 \int_{-L/2}^{+L/2} dx_1 \left[\int_{-\infty}^{-L/2} dx_2 + \int_{L/2}^{+\infty} dx_2 \right] \langle x_1 | \hat{T} | x_2 \rangle \langle x_2 | e^{-\beta \hat{T}} | x_1 \rangle \quad (57)$$

Les éléments de matrice donnent :

$$\langle x_1 | \hat{T} | x_2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \delta^{(2)} (x_2 - x_1)$$
 (58)

$$\langle x_2 | e^{(-\beta \hat{T})} | x_1 \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_1 e^{\frac{i}{\hbar} (x_2 - x_1) p_1 - \beta \frac{p_1^2}{2m}}$$
(59)

$$= \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} e^{-\frac{m(x_2-x_1)^2}{2\beta\hbar^2}} \tag{60}$$

où $\delta^{(2)}$ désigne la dérivée seconde de la distribution de Dirac.

• Calcul du terme (56) : $-V_0 e^{\beta V_0} \int_{-L/2}^{+L/2} dx_1 \int_{-L/2}^{+L/2} dx_2 \langle x_1 | \hat{T} | x_2 \rangle \langle x_2 | e^{-\beta \hat{T}} | x_1 \rangle$

Ce terme donne :

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/2} \frac{V_0 e^{\beta V_0}}{\sqrt{\beta}} \int_{-L/2}^{+L/2} dx_1 \int_{-L/2}^{+L/2} dx_2 e^{-a(x_2 - x_1)^2} \delta^{(2)}(x_2 - x_1) \tag{61}$$

où

$$a = \frac{m}{2\beta\hbar^2}.$$
(62)

En faisant le changement de variable suivant : $\begin{cases} u = x_2 + x_1 \\ v = x_2 - x_1 \end{cases} \begin{cases} x_1 = \frac{u+v}{2} \\ x_2 = \frac{u-v}{2} \end{cases} \text{ pour lequel le jacobien vaut } \mathcal{J} = 1/2, \text{ le terme (56) s'écrit comme une intégrale sur un losange : } \end{cases}$

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/2} \frac{V_0 e^{\beta V_0}}{\sqrt{\beta}} \int_0^L du \int_{x-L}^{-x+L} dv e^{-av^2} \delta^{(2)}(v) \tag{63}$$

qui donne, après 2 intégrations par parties successives, on retrouve une distribution δ , qu'il est trivial d'intégrer :

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/2} \frac{V_0 e^{\beta V_0}}{\sqrt{\beta}} \int_0^L du \cdot (-2a) \tag{64}$$

qui donne donc pour résultat final :

$$-\frac{V_0 e^{\beta V_0}}{4\sqrt{\pi}\beta^{3/2}} \left(\frac{2mL^2}{\hbar^2}\right)^{1/2} \tag{65}$$

• Calcul du terme (57) : $-V_0 \int_{-L/2}^{+L/2} dx_1 \left[\int_{-\infty}^{-L/2} dx_2 + \int_{L/2}^{+\infty} dx_2 \right] \langle x_1 | \hat{T} | x_2 \rangle \langle x_2 | e^{-\beta \hat{T}} | x_1 \rangle$

Intéressons nous enfin au dernier terme à calculer pour obtenir l'ordre 2 en β de la fonction de partition, c'est à dire le terme (57). Ce dernier vaut :

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/2} \frac{V_0}{\sqrt{\beta}} \int_{-L/2}^{+L/2} dx_1 \left[\int_{-\infty}^{-L/2} dx_2 + \int_{L/2}^{+\infty} dx_2\right] e^{-a(x_1 - x_2)^2} \delta^{(2)}(x_2 - x_1) \tag{66}$$

Cette intégrale n'est non nulle que lorsque des points vérifiant $x_1 = x_2$ se trouvent dans le domaine d'intégration. Or, pour la première partie de l'intégrale, il n'y a qu'un seul point de ce type : $x_1 = x_2 = -L/2$, et, de la même manière pour la seconde partie, il n'y a que $x_1 = x_2 = +L/2$. Donc, l'intégrant n'est non nul que sur un ensemble de mesure nulle (à savoir l'union des singletons : $\{-L/2, -L/2\} \cup \{L/2, L/2\}$). On peut donc directement en conclure que le terme (57) est nul.

• Compilation des résultats

Nous avions séparé le calcul des termes (56) et (57) qui s'ajoutent pour donner la contribution de la trace suivante :

$$Tr(e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{T}}\hat{V}\hat{T}) = -\frac{V_0 e^{\beta V_0}}{4\sqrt{\pi}\beta^{3/2}} \left(\frac{2mL^2}{\hbar^2}\right)^{1/2} + 0$$
(67)

A présent, pour obtenir la correction globale d'ordre 2 en β , il faut rassembler les deux termes du commutateur $[\hat{T}, \hat{V}]$, que nous avions calculés séparément. Le bilan de (53), (65), et du fait que (57) soit nul, s'écrit :

$$Tr(e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{T}}[\hat{T},\hat{V}]) = \left\{ -\frac{V_0 e^{\beta V_0}}{4\sqrt{\pi}\beta^{3/2}} \left(\frac{2mL^2}{\hbar^2}\right)^{1/2} \right\} - \left\{ -\frac{V_0 e^{\beta V_0}}{4\sqrt{\pi}\beta^{3/2}} \left(\frac{2mL^2}{\hbar^2}\right)^{1/2} + 0 \right\}$$
(68)

D'où

$$Tr(e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{T}}[\hat{T},\hat{V}]) = 0$$
(69)

Grâce au développement opératoriel introduit dans la section précédente, nous avons pu calculer les traces sur des bases adaptées à notre problème (le puits carré fini à une dimension), et finalement démontrer que :

$$Z(\beta) = Z_{cl}(\beta) + \mathcal{O}(\beta^3)$$
(70)

3.4 Interprétations

Le calcul précédent nous affirme qu'à l'ordre 2 en β , le fait que le puits soit de profondeur finie ne donne aucune correction dans la fonction de partition, et donc, par conséquent, dans la densité de niveaux. La démarche naturelle serait donc de calculer les ordres supérieurs jusqu'à trouver un ordre non nul. Il serait, à mon avis, assez surprenant de trouver un ordre supérieur à 2, non nul : En effet, le potentiel choisi est très simple, et de ce fait, nous suspectons que tous les ordres donneront 0, bien que nous n'ayions pas encore d'argument général pour pouvoir l'affirmer avec certitude.

Si cela est le cas, il est clair que les corrections que l'on recherche ne sont pas contenues dans le développement en β , et d'autre part, le terme correctif que l'on recherche est **la seule** différence entre le résultat exact, et le terme dominant de Thomas-Fermi. Comment expliquer ceci? L'hypothèse la plus probable est que ce développement serait celui d'une *série asymptotique* : la resommation globale des termes de la série peut, ou pas, converger, et tronquer la série à un certain ordre n'en donne pas forcément une bonne approximation. Mais surtout, le développement que nous avons fait est encore un développement, implicite, en puissances de \hbar . Donc il est possible que la correction que l'on recherche ne se manifeste qu'à un ordre inférieur en \hbar : par exemple, à un ordre exponentiellement petit. Si c'est bien le cas, même si la série converge, sa limite ne sera pas celle attendue. Nous cherchons actuellement à trouver un moyen de faire apparaître ces corrections dans un développement plus fin.

Nous avons une bonne raison de penser que le terme que l'on recherche est bien exponentiellement petit en \hbar :

Considérons le problème d'une particule quantique dans un puits carré, de largeur L (de x = -L/2à L/2) et de profondeur finie V_0 (mais ici, nous prenons comme convention que : $V(x) = V_0$ pour $|x| \ge L/2$ et 0 sinon). On sait que l'allure d'une fonction d'onde propre dans la zone classiquement interdite est une exponentielle décroissante :

$$\Psi_n(x) \propto e^{-\frac{|x| - L/2}{\lambda_n}} \tag{71}$$

pour $|x| \ge L/2$, avec

$$\lambda_n = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m(V_0 - E_n)}} \tag{72}$$

Alors, si nous considérons une particule dans un état prore $|\Psi_n\rangle$, la probabilité de présence n'est pas négligeable dans la zone classiquement interdite, et est proportionnelle à :

$$|\Psi_n(x)|^2 \propto e^{-2\frac{|x|-L/2}{\lambda_n}}$$
 (73)

Donc, la particule peut occuper une boîte dont la taille vaut celle du puits à laquelle on rajoute une longueur de l'ordre de quelques $\frac{\lambda_n}{2}$. Or la formule de Weyl tient compte du volume comme d'un facteur multiplicatif dans la densité de niveaux. Notre intuition est la suivante : la formule de Weyl corrigée pour le puits carré de profondeur V_0 est la même que pour un billard 1D (28), en remplaçant L par $L + a \frac{\lambda(E)}{2}$ ou a est une constante et $\lambda(E) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m(V_0 - E)}^3}$:

$$\bar{N}^{1D}(E) = \frac{L + a\frac{\lambda(E)}{2}}{\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \sqrt{E}$$
(74)

Afin de confirmer cette conjecture, nous allons étudier numériquement le problème.

3.5 Résultats numériques

3.5.1 Puits carré (1 dimension)

Considérons encore le problème d'une particule quantique dans un puits carré, de largeur L(de x = -L/2 à L/2) et de profondeur finie V_0 ($V(x) = V_0$ pour $|x| \ge L/2$ et 0 sinon). Nous prenons comme unités : $\hbar = m = 1$, $V_0 = 1000$, et L = 10. Nous allons tracer numériquement le spectre, et la fonction de comptage N(E) en fonction de l'énergie E. Comparons tout d'abord les spectres et les fonctions de comptage pour des puits de profondeur finie et infinie :



FIG. 1 – Spectres : numérique pour le puits fini, analytique pour le puits infini.

On constate bien que les niveaux du puits fini sont inférieurs aux niveaux du puits infini.

En Fig. 2, nous comparons la fonction de comptage du puits fini déterminée numériquement, la formule de Weyl⁴ (28), et la conjecture⁵ proposée en (74):

Comme prévu, la fonction de comptage du puits fini est au dessus de la formule de Weyl, car cette dernière donne exactement la partie lisse de la fonction de comptage des niveaux du puits infini, qui sont, comme stipulé en Fig. 1, supérieurs à ceux du puits fini. Par contre, la formule

³Nous allons appliquer cette hypothèse non pas pour la densité de niveaux, mais pour la fonction de comptage $\bar{N}(E)$

⁴Que l'on a intégré afin d'obtenir la fonction de comptage de Weyl

⁵Nous avons pris un coefficient a semi-arbitrairement : a = 2 qui tient compte que la fonction d'onde pénètre des deux cotés du puits



FIG. 2 – En fonction de l'énergie, la fonction de comptage numérique, la formule de Weyl, et la conjecture (74) avec a = 2

conjecturée ne donne pas de résultats satisfaisants : Elle est censée "corriger" la formule de Weyl, or elle s'éloigne de la réalité. De plus, elle est supposée être meilleure à haute énergie, ce qui n'est manifestement pas le cas. En réalité il faut ajuster notre coefficient a que nous avons plus ou moins arbitrairement fixé à 2. Nous allons donc, tout naturellement, tracer la quantité :

$$2\pi \frac{\bar{N}^{Num}(E) - \bar{N}^{Weyl}(E)}{\sqrt{E}} \sqrt{V_0 - E}$$
(75)

en fonction de l'énergie, et où $\overline{N}^{Num}(E)$ est la fonction de comptage numérique que l'on a lissée. Si notre modèle est correct, cette grandeur vaut *a*. Donc, le graphe espéré dans ce cas est une constante, ou au moins, quelque chose de "relativement" constant pour les énergies intermédiaires (i.e. loin du fond du puits et du continuum). Le résultat est le suivant : Le coefficient *a* préconisé



FIG. 3 – La grandeur (75) en fonction de l'énergie.

par ce graphe est de l'ordre de 0.05. Toutefois, on voit que la courbe n'est pas constante et varie

23

sur de longues échelles d'énergie, ce qui aurait tendance à infirmer notre modèle. Autre remarque qui va dans le même sens : le coefficient déterminé numériquement est très petit devant la valeur attendue (de l'ordre de l'unité). Ceci indique que l'effet que nous essayons de décrire est quasiment négligeable. Nous y reviendrons en conclusion de cette partie. Le bilan de l'étude numérique du puits carré à 1 dimension est plutôt négatif concernant notre prédiction. Nous allons l'étayer par l'étude du puits sphérique.

3.5.2 Puits sphérique (3 dimensions)

Les données numériques utilisées dans la suite de cette section m'ont été cordialement données par Alejandro Monastra⁶, que je remercie de tout cœur. C'est pourquoi la convention d'énergie n'est pas la même que celle choisie à 1 dimension. Nous considérons l'analogue du problème précédent à 3 dimensions : Une particule quantique dans un puits sphérique, de rayon R et de profondeur finie V_0 ($V(r) = -V_0$ pour $|r| \le R$ et 0 sinon). Nous allons prendre $\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mL^2}}$ comme unité d'énergie, et nous travaillerons avec 2 profondeurs de puits différentes : $V_0 = 1500$ et $V_0 = 2500$. Pour une sphère de profondeur infinie, la formule de Weyl donne :

$$\bar{N}^{Weyl}(E) = \frac{V}{6\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E+V_0)^{3/2} - \frac{S}{16\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) (E+V_0) + \frac{\mathcal{L}}{8\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \sqrt{E+V_0} \quad (76)$$

Si nous suivons le même raisonnement que précédemment, il nous faut, dans V, S et \mathcal{L} , remplacer R par $R + \frac{a}{2}\lambda(E)$ où $\lambda(E)$ est maintenant défini par :

$$\lambda(E) = \sqrt{\frac{-\hbar^2}{2mE}} \tag{77}$$

A 3 dimensions, nous ne pouvons pas extraire le coefficient a aussi facilement qu'en (75), car a est présent dans de nombreux termes, à ordres 1, 2 et 3. Donc nous allons utiliser une procédure d'ajustement de courbe sur une gamme d'énergie raisonnable : en restant loin du fond du puits, et loin du continuum. On compare ici la fonction de comptage numérique, la formule de Weyl, et notre conjecture, dans laquelle le coefficient a est ajusté. Nous obtenons la Fig. 4, respectivement, pour $V_0 = 1500$ et $V_0 = 2500$:

Nous constatons sur ces graphes que notre conjecture reste proche de la réalité sur une gamme d'énergie bien plus large que celle sur laquelle la formule de Weyl convient. En fait la formule de Weyl reste convenable sur le premier tiers du spectre, tandis que notre hypothèse semble être valable pour les trois premiers quarts. D'autre part, les valeurs du coefficient a données par l'ajustement, proches de l'unité, sont bien plus encourageants que pour la dimension 1. Afin d'affiner la validité de ce modèle à 3 dimensions, nous allons tracer l'erreur relative par rapport à la fonction de comptage numérique en fonction de l'énergie :

On peut voir que pour les énergies intermédiaires, l'erreur relative fluctue autour d'une moyenne de l'ordre de 10^{-4} . Ces fluctuations sont dues au fait que l'on compare notre modèle de partie lisse à la fonction de comptage réelle, qui fluctue par nature. D'où la nécessité de s'intéresser à la moyenne.

Nous pouvons conclure ici que l'étude du puits sphérique valide tout à fait le modèle que nous avons supposé.

 $^{^{6}}$ Quantum Chaos Group - Laboratorio Tandar, CNEA, Buenos Aires



FIG. 4 – Pour $V_0 = 1500$ (resp. $V_0 = 2500$), l'ajustement fait dans [-1400, -300] (resp. [-2400, -500]) donne un coefficient a = 1.16 (resp. a = 1.10) avec une incertitude inférieure à 10^{-3}



FIG. 5 – Pour $V_0 = 1500$ et $V_0 = 2500$, les erreurs relatives, ainsi que leurs moyennes

3.5.3 Interprétation des résultats numériques

Nous avons vu dans les 2 sections précédentes qu'à 1 dimension, notre modèle ne corrigeait en rien la formule de Weyl, qui elle, était déja très proche de la réalité. Cependant, à 3 dimensions, notre conjecture colle relativement bien aux données numériques, tandis que la formule de Weyl, a une zone de validité bien plus restreinte. A-t-on un effet de dimensionnalité? L'explication la plus plausible à ce jour est la suivante : Tandis qu'à 1 dimension, les niveaux ont tendances à se rarifier à haute énergie, à 3 dimensions, au contraire, ils se densifient. Or, notre modèle revient à dire que chaque niveau n'est pas compté pour 1 mais pour un nombre supérieur à 1, qui dépend de la distance entre son énergie et le continuum. Donc, si les niveaux se rarifient, l'effet est atténué, par contre, s'ils se densifient, l'effet devient non négligeable. Il est possible que ceci explique qu'à 1 dimension, on ne voit presque pas de différence entre la formule de Weyl et la réalité, tandis qu'à 3 dimensions, notre modèle convient beaucoup mieux que la formule de Weyl. Enfin, la divergence à

proximité du continuum n'est qu'une pathologie de notre modèle : en effet, cela est dû à la forme de λ , qui tend vers l'infini lorsque l'énergie tend vers le bord du puits. On peut donc considérer que la correction recherchée dans cette dernière partie est bien exponentiellement petite et due à l'éffet tunnel.

Conclusion et perspectives

A l'issue de ce rapport de stage, nous avons pu voir le formalisme général relatif à la densité de niveaux, nous familiariser avec les développements semi-classiques, et notamment comprendre le cadre de l'application d'une telle approximation, du type Thomas-Fermi. Nous avons vu que l'exemple choisi, supposé simple, ne faisait pas partie de ce cadre, et donc nous avons essayé de trouver une méthode alternative permettant de corriger la formule de Weyl pour l'étude d'un système semi-ouvert, tout en s'inspirant du développement ETF. Nous avons progressé dans l' analyse de la nature des corrections recherchées, sans avoir complètement abouti. Nous avons à présent, la quasi-certitude que ces corrections, dues à l'effet tunnel, sont de nature exponentielle, et qu'elle n'apparaissent pas dans le modèle de Thomas-Fermi. Les résultats numériques vont dans ce sens, il reste maintenant à le montrer analytiquement.

Sur un plan plus personnel, j'ai été enchanté de travailler avec Patricio Leboeuf, de qui j'ai appris énormément de choses. De plus, ce stage m'a conforté dans l'idée de poursuivre vers une thése théorique, dirigée par Patricio Leboeuf. Toutefois, par moment, cette expérience a été perturbante du fait que ce que nous pensions être assez simple, à savoir corriger la formule de Weyl pour les systèmes semi-ouverts grâce au modèle ETF, s'est compliqué de jours en jours. Mais je suis d'autant plus heureux que nous ayions pu commencé à éclaircir ce problème.

Malgré la satisfaction que m'a apporté cette thématique, je compte plutôt orienter ma thèse vers le traitement des intéractions dans la localisation d'Anderson. C'est également un sujet qui me passionne, sur lequel j'ai déjà pu travailler en stage de Master 1. Enfin, j'espère de tout cœur que la collaboration avec Alejandro Monastra se développera durant cette thèse.

Annexe 1 : Quantification de Bohr-Sommerfeld

On se propose dans cette annexe de résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire d'énergie E, à une dimension, à l'ordre 0 en \hbar . On écrit la fonction d'onde sous la forme :

$$\Psi(x) = A(x)e^{i\frac{S(x)}{\hbar}} \tag{78}$$

où A(x) et S(x) sont des fonctions complexes de la variable réelle x. En insérant cette forme dans l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\Psi(x) = E\Psi(x) \tag{79}$$

et en ne conservant que l'ordre 0 en \hbar , on obtient facilement l'équation simple suivante :

$$S'(x)^2 = 2m(E - V(x))$$
(80)

ce qui assure que cette approximation sous-entend que l'on se trouve dans une zone telle que l'énergie E est supérieure au potentiel V(x). Or le membre de droite dans la dernière équation n'est autre que le carré de l'impulsion classique d'énergie E:

$$p_{cl}(x) = 2m(E - V(x))$$
 (81)

On peut donc écrire S(x) comme :

$$S(x) = \int_{x_0}^{x} p_{cl}(x') dx'$$
(82)

Or, la fonction d'onde, devant nécessairement être monovaluée, en parcourant un tour sur le contour d'énergie E dans l'espace des phases, la phase S_0 accumulée ne doit pas changer la valeur de la fonction d'onde. Nous obtenons donc que :

$$S_0(E) = nh$$
 avec $n = 0, 1, 2...$ (83)

Ceci signifie que l'action classique d'une orbite classique périodique sur une période se quantifie en étant un multiple de la constante de Planck h. Ceci est appelé la quantification de Bohr-Sommerfeld.

Par exemple, dans le cas de l'oscillateur harmonique à une dimension, toutes les orbites périodiques ont la même période : $\frac{2\pi}{\omega}$. Et sachant la propriété de mécanique hamiltonienne concernant l'action \S_0 d'une orbite périodique de période T, d'énergie E :

$$\frac{\partial S_0}{\partial E} = T \tag{84}$$

on obtient, dans le cas particulier de l'oscillateur harmonique que :

$$S_0 = \frac{2\pi E}{\omega} \tag{85}$$

A présent, si l'on applique la quantification de Bohr-Sommerfeld, nous obtenons que :

$$\frac{2\pi E_n}{\omega} = n\hbar \qquad \text{soit} \qquad E_n = n\hbar\omega \tag{86}$$

On retrouve le spectre, bien connu, de l'oscillateur harmonique quantique.

D'autre part, si l'on revient sur la formule exacte de la densité de niveaux de l'oscillateur harmonique quantique donnée en (16), l'argument du *cos* peut s'interpréter comme le rapport de l'action classique de l'orbite périodique ayant parcouru k tours, par \hbar . Ceci est en fait généralisable par la *Formule des Traces de Gutzwiller*⁷.

⁷Référence [1]

Annexe 2 : Formule de Poisson

Soit f une fonction définie sur \mathbb{R} , et un paramètre a réel positif. Définissons la fonction F par :

$$F(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(x - na)$$
(87)

La fonction F est, par définition périodique, de période a, donc elle peut sécrire, sous la forme d'une série de Fourier :

$$F(x) = \sum_{\nu = -\infty}^{+\infty} F_{\nu} e^{2i\pi \frac{\nu x}{a}}$$
(88)

où

$$F_{\nu} = \frac{1}{a} \int_{0}^{a} F(x) e^{-2i\pi \frac{\nu x}{a}} dx$$
(89)

En remplaçant F par sa définition, on obtient que :

$$F_{\nu} = \frac{1}{a} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \int_{0}^{a} f(x - na) e^{-2i\pi \frac{\nu x}{a}} dx$$
(90)

Dans la *n*-ième intégrale, on fait le changement de variable y = x - na. Ceci donne :

$$F_{\nu} = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} f(y) e^{-2i\pi \frac{\nu y}{a}} dy = \frac{1}{a} \hat{f}(\frac{2\pi\nu}{a})$$
(91)

où \hat{f} représente la transformée de Fourier de la fonction f. Finalement, en exprimant F(x) de deux façons, on obtient la Formule de Poisson :

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(x-na) = \frac{1}{a} \sum_{\nu=-\infty}^{+\infty} \hat{f}(\frac{2\pi\nu}{a}) e^{2i\pi\frac{\nu x}{a}}$$
(92)

Appliquons maintenant cette formule à la formule (19) : Prenons $f(x) = \delta(x)$ et a = 1 :

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x-n) = \sum_{\nu=-\infty}^{+\infty} e^{2i\pi\nu x}$$
(93)

En regroupant les termes correspondant à ν et $-\nu$, on obtient :

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x-n) = 1 + 2\sum_{\nu=1}^{+\infty} \cos(2i\pi\nu x)$$
(94)

Enfin, pour ne garder que la somme sur les entiers n positifs, comme dans la formule (19), il suffit de prendre x positif. Or dans la formule (19), on a bien $F(E) \leq 0$. On peut donc conclure que :

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \delta(F(E) - n) = 1 + 2\sum_{k=1}^{+\infty} \cos(2k\pi F(E))$$
(95)

Annexe 3 : Formule de Weyl

Nous allons ici calculer la partie lisse de la densité d'états d'un billard à 3 dimensions, en faisant un développement sur la fonction de Green, puis en en prenant la transformée de Laplace inverse. Pour ce faire, calculons tout d'abord la fonction de Green libre à 3 dimensions $G_0(\vec{r}, \vec{r'}, E)$. Cette dernière vérifie :

$$\left(E - \hat{H}_{\vec{r}}\right) G_0(\vec{r}, \vec{r'}, E) = \delta(\vec{r} - \vec{r'})$$
(96)

où $\hat{H}_{\vec{r}}$ est l'Hamiltonien libre écrit en représentation \vec{r} :

$$\hat{H}_{\vec{r}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\Delta}_{\vec{r}} \tag{97}$$

Pour calculer $G(\vec{r}, \vec{r'}, E)$, passons dans l'espace de Fourier spatial : Soit $\hat{G}_O(\vec{k}, E)$ la transformée de Fourier de $G(\vec{r}, \vec{r'}, E)^8$. $\hat{G}_O(\vec{k}, E)$ vérifie l'équation :

$$(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m})\hat{G}_0(\vec{k}, E) = 1$$
(98)

D'où

$$\hat{G}_0(\vec{k}, E) = \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$
(99)

Pour retrouver la fonction de Green spatiale, prenons la transformée de Fourier inverse :

$$G_O(r, E) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k} \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$
(100)

En passant en coordonnées sphériques, ou \vec{r} est vecteur directeur de l'axe privilégié, nous obtenons :

$$G_O(r, E) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \int_0^\pi d\theta k^2 \sin(\theta) \frac{e^{-ikr\cos(\theta)}}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$
(101)

L'intégrale portant sur θ est directe, ce qui donne :

=

$$G_O(r, E) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr}$$
(102)

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{k e^{ikr}}{ir(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m})}$$
(103)

Les pôles de l'intégrant sont $\pm q_{\epsilon} = \pm \sqrt{\frac{2m(E+i\epsilon)}{\hbar^2}}$ où ϵ est un régulateur destiné à déplacer les pôles (simples) de l'axe réel du plan complexe. Après intégration, nous le ferons tendre vers 0⁹. D'après le théorème des résidus, nous obtenons :

$$G_O(r, E) = \frac{2im}{(2\pi)^2 r \hbar^2} \left(\frac{2i\pi q e^{iqr}}{2q}\right)$$
(104)

 $^{9}\mathrm{A}$ ce moment, nous pour rons écrire $q=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^{2}}}$

⁸En fait, dans notre cas, G_0 ne dépend que de $|\vec{r} - \vec{r'}|$ et de E, ce qui nous permet de prendre la transformée de Fourier par rapport à une seule variable : $|\vec{r} - \vec{r'}|$. Dorénavant nous confondrons $G_0(\vec{r}, \vec{r'}, E)$ et $G_0(|\vec{r} - \vec{r'}|, E)$.

qui se simplifie et donne :

$$G_O(r, E) = \frac{-me^{iqr}}{2\pi r\hbar^2}$$
(105)

où, pour revenir à la définition première de la fonction de Green :

$$G_O(\vec{r}, \vec{r'}, E) = \frac{-me^{iq|\vec{r} - \vec{r'}|}}{2\pi\hbar^2 |\vec{r} - \vec{r'}|}$$
(106)

où $q = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Nous devons maintenant prendre la trace de la partie imaginaire de cette fonction de Green pour obtenir la partie lisse de la densité de niveaux. Nous obtenons donc que :

$$\mathcal{I}m(G_0(r, r', E)) = \frac{-m\sin(q|\vec{r} - r'|)}{2\pi\hbar^2|\vec{r} - \vec{r'}|}$$
(107)

qui tend, quand $\vec{r} \rightarrow \vec{r'}$, vers :

$$\mathcal{I}m(G_0(r,r,E)) = \frac{-mq}{2\pi\hbar^2} \tag{108}$$

Donc, d'aprés la formule (13),

$$\bar{\rho}(E) = \frac{mV}{2\pi\hbar^2} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$
(109)

$$\bar{\rho}(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E}$$
(110)

où V est le volume du billard. On retrouve bien le terme dominant de la formule de Weyl montrée en (28). Toutefois, il est capital de remarquer que dans la démarche suivie ici, nous avons fait l'approximation que la particule était libre dans le volume V. En aucun cas, nous n'avons supposé l'éventualité d'une réflexion sur l'un des bords du billards. C'est justement cette approximation qui implique que l'on obtienne le terme dominant de la partie lisse de la densité, et non pas la partie lisse exacte. En fait, on n'obtient pas de terme fluctuant car on a remplacé le spectre par un spectre continu($\sum_n \to \int d^3 \vec{k}$). Si nous poussons le développement plus loin : on peut envisager que pour aller d'un point \vec{r} à un point $\vec{r'}$, la particule peut soit y aller librement (comme ce que nous avons fait), où bien taper une fois sur le bord du billard. Dans ce cas, nous devons préalablement préciser que les conditions aux limites choisies sont celle de Dirichlet : C'est à dire que la valeur de la fonction de Green en un point $(\vec{r}, \vec{r'})$ est nulle si \vec{r} ou $\vec{r'}$ appartient à la frontière du billard. De plus, nous faisons l'approximation que cette frontière est "douce", afin que, localement, on puisse l'assimiler à un plan. Ecrivons en premier lieu :

$$G = G_0 + G_1 \tag{111}$$

où G_1 désigne la fonction de Green décrivant le déplacement de la particule de \vec{r} à $\vec{r'}$ par un rebond sur la surface du billard. Comme précisé préalablement, on considére que cette surface est plane au voisinage de \vec{r} et $\vec{r'}$ (nous les prenons voisins puisqu'il s'agira de prendre la trace par la suite). Alors G_1 doit vérifier :

$$\left(E - \hat{H}_{\vec{r}}\right) G_1(\vec{r}, \vec{r'}, E) = 0 \quad \text{pour} \qquad \vec{r} \text{ et } \vec{r'} \in V$$
(112)

$$G_0(\vec{r}, \vec{r'}, E) + G_1(\vec{r}, \vec{r'}, E) = 0 \text{ pour } \vec{r} \text{ ou } \vec{r'} \in S$$
 (113)

La première équation vient du fait que $G = G_0 + G_1$ doit satisfaire l'équation (96), et la deuxième est la traduction des conditions aux bords choisies pour G(Dirichlet).

Si l'on prend $G_1(\vec{r}, \vec{r'}, E) = -G_0(\vec{r_1}, \vec{r'}, E)$ où $\vec{r_1}$ est le symétrique de \vec{r} par rapport à la surface S^{10} , ces deux conditions sont satisfaites :

• Si l'on prend \vec{r} dans le volume V :

$$\left(E - \hat{H}_{\vec{r}}\right) G_1(\vec{r}, \vec{r'}, E) = -\left(E - \hat{H}_{\vec{r}}\right) G_0(\vec{r_1}, \vec{r'}, E)$$
(114)

$$= -\delta(\vec{r_1} - \vec{r'}) \tag{115}$$

$$= 0 \operatorname{car} \vec{r_1} \notin V \operatorname{et} \vec{r'} \in V$$
(116)

• Si l'on prend \vec{r} sur la frontière S alors $\vec{r_1} = \vec{r}$ donc on a aisément :

$$G_0(\vec{r}, \vec{r'}, E) + G_1(\vec{r}, \vec{r'}, E) = 0$$
(117)

Donc, si l'on tient compte de l'éventualité d'un "rebond" sur la surface S, on obtient que ¹¹ :

$$G(\vec{r}, \vec{r'}, E) = G_0(\vec{r}, \vec{r'}, E) - G_0(\vec{r_1}, \vec{r'}, E)$$
(118)

Il faut, à présent, prendre la trace de la partie imaginaire de cette dernière fonction de Green. Bien sûr, nous retrouvons le premier terme qui donne le terme dominant de la formule de Weyl. Il ne nous reste qu'à calculer $\bar{\rho}_1(E)$ défini par :

$$\bar{\rho}_1(E) = -\frac{1}{\pi} \int d^3 \vec{r} \mathcal{I} m(G_1(\vec{r}, \vec{r}, E))$$
(119)

$$= -\frac{1}{\pi} \int d^3 \vec{r} \mathcal{I} m \left(\frac{m e^{iq|\vec{r_1} - \vec{r}|}}{2\pi\hbar^2 |\vec{r_1} - \vec{r}|} \right)$$
(120)

On passe maintenant dans une base plus adaptée pour calculer la Trace : \vec{s} désigne le projeté orthogonal de \vec{r} sur la surface S, et t, la distance de \vec{r} à la surface S. Le jacobien vaut 1, et l'on obtient :

$$\bar{\rho}_1(E) = -\frac{1}{\pi} \int d^2 \vec{s} \int_0^{+\infty} dt \frac{m \sin(2qt)}{4\pi\hbar^2 t}$$
(121)

$$\bar{\rho}_1(E) = -\frac{mS}{4\pi^2\hbar^2} \int_0^\infty dt \frac{\sin(2qt)}{t}$$
(122)

Or, l'intégrale sur les \mathbb{R}^+ du sinus cardinal vaut $\frac{\pi}{2},$ ce qui donne finalement que :

$$\bar{\rho}_1(E) = -\frac{mS}{8\pi\hbar^2} = -\frac{S}{16\pi}\frac{2m}{\hbar^2}$$
(123)

C'est bien le résultat attendu d'après la formule (28). Donc Finalement, nous obtenons bien :

$$\bar{\rho}(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E} - \frac{S}{16\pi} \frac{2m}{\hbar^2} + \cdots$$
(124)

 $^{^{10}\}vec{r_{1}}$ est alors hors du volume V au sens strict.

¹¹Si l'on avait choisi les conditions limites de Neumann, nous aurions obtenu un signe + au lieu du - dans la formule (118)

Annexe 4 : Densité de niveaux de l'oscillateur harmonique

La densité d'états d'une particule dans un potentiel harmonique à une dimension est donnée par :

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{\hbar\omega} + \frac{2}{\hbar\omega} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \cos\left(\frac{2\pi k\varepsilon}{\hbar\omega}\right) \qquad \text{avec} \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Ci-dessous sont représentés des approximations de cette formule où la somme infinie est limitée à un ordre k_{max} ($\hbar \omega = 1$).



On voit donc que la formule converge vers la densité d'états exacte qui est un peigne de Dirac régulier :

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \delta(\varepsilon - n\hbar\omega)$$

35

Références

- [1] Martin C. Gutzwiller, Chaos in Classical and Quantum Mechanics, Springer-Verlag (1990).
- [2] Claude Cohen-Tannoudji, Franck Laloë, Bernard Diu, Mécanique Quantique 1.
- [3] Matthias Brack, Rajat K. Bhaduri, *Semiclassical Physics*, (1997).
- [4] R. Balian & C. Bloch, Distribution of Eigenfrequencies for the Wave Equation in a Finite Domain, Annals Of Physics: 60, 401-447, (1970)
- [5] Jean Zinn-Justin, Intégrale de chemin en mécanique quantique : Introduction, CNRS Editions (2003).
- [5] Patricio Leboeuf, *Regularity and chaos in the nuclear masses*, Lecture notes in physics, Springer, Berlin, (1969).