

CDU 53 (469) (05)

PORTUGALIAE PHYSICA

VOLUME 5
1969 - 1970

INSTITUTO DE ALTA CULTURA
CENTROS DE ESTUDOS DE FÍSICA DAS UNIVERSIDADES PORTUGUESAS

PORTUGALIAE PHYSICA

Fundadores: A. Cyrillo Soares, M. Telles Antunes, A. Marques da Silva,
M. Valadares.

VOLUME 5

1969-70

VOLUMES PUBLICADOS.

Vol. 1 — 1943-45 — 326 pp.

Vol. 2 — 1946-47 — 256 pp.

Vol. 3 — 1949-54 — 173 pp.

Vol. 4 — 1965-66 — 304 pp.

Vol. 5 — 1969-70 — 194 pp.

Redacção: Laboratório de Física da Faculdade de Ciências—Lisboa-2
(PORTUGAL)

Comissão de redacção:

J. Moreira de Araújo — Carlos Braga
— Carlos Cacho — A. Pires de Car-
valho — M. Abreu Faro — J. Gomes
Ferreira — F. Bragança Gil — Manuel
Laranjeira

Amaro Monteiro — J. Pinto Peixoto
— J. da Providência — Lídia Sal-
gueiro—J. de Almeida Santos — José
Sarmiento — António da Silveira —
J. Veiga Simão.

ÍNDICES

MATÉRIAS

MATIÈRES - MATTERS

VOLUME 5

Fasc. 1/2 (1967-68)

- Le transfert de la chaleur et la non invariance relativiste des pressions. Le formalisme invariant de la mécanique non adiabatique des milieux continus*, par ANTÓNIO BROTA 3-30
- The spurious states problem and an extension of the R.P.A.*, by J. DA PROVIDÊNCIA and C. M. SHAKIN 31-47

Fasc. 3 (1968)

- Convergence and concentration dependence of isotopic thermal diffusion factor*, by M. F. LARANJEIRA, M. ÁUREA CUNHA and M. E. FRONTEIRA E SILVA 49-59
- Concentration dependence of the isotopic thermal diffusion factor for mixtures ^3He - ^4He and H_2 - D_2* , by M. F. LARANJEIRA, M. ÁUREA CUNHA and M. E. FRONTEIRA E SILVA 61-70
- Approximate methods in nuclear structure calculations — hartree-fock theory and random-phase-approximation*, by J. DA PROVIDÊNCIA 71-92
- Mécanismes de transfert à un nucléon*, par R. DA SILVEIRA 93-117
- Note on correlation energy of the electron gas*, by LÍDIA FERREIRA 119-122

Fasc. 4 (1969)

<i>A simplified version of the random-phase approximation and the problem of the correlation energy of a many-fermion system</i> , by J. DA PROVIDÊNCIA	125
<i>Stationary states with minimum entropy production and non constant phenomenological coefficients</i> , by J. J. DELGADO DOMINGOS	139
<i>Les résonances en physique des hautes énergies</i> , par R. NATAF	145
<i>Liste des publications reçues actuellement en échange avec Portugaliae Physica</i>	189
<i>Instructions pour les auteurs</i>	193

AUTORES

AUTEURS - AUTHORS

BROTAS, António — <i>Le transfert de la chaleur et la non invariance relativiste des pressions. Le formalisme invariant de la mécanique non adiabatique des milieux continus</i>	3
CUNHA, M. Áurea — vd. M. F. LARANJEIRA	
DOMINGOS, J. J. Delgado — <i>Stationary states with minimum entropy production and non constant phenomenological coefficients</i>	139
FERREIRA, Lúdia — <i>Note on correlation energy of the electron gas</i>	119
LARANJEIRA, M. F., CUNHA, M. Áurea and SILVA, M. E. Fronteira e — <i>Convergence and concentration dependence of isotopic thermal diffusion factor</i>	49
LARANJEIRA, M. F., CUNHA, M. Áurea and SILVA, M. E. Fronteira e — <i>Concentration dependence of the isotopic thermal diffusion factor for mixture $^3\text{He} - ^4\text{He}$ and $\text{H}_2 - \text{D}_2$</i>	61
NATAF, R. — <i>Les résonances en physique des hautes énergies</i>	145
PROVIDÊNCIA, J. da & SHAKIN, C. M. — <i>The spurious states problem and an extension of the R.P.A.</i>	31

PROVIDÊNCIA, J. da — <i>Approximate methods in nuclear structure calculations — hartree-fock theory and random-phase-approximation</i>	71
PROVIDÊNCIA, J. da — <i>A simplified version of the random-phase approximation and the problem of the correlation energy of a many-fermion system</i>	125
SHAKIN, C. M. — vd. J. da PROVIDÊNCIA	
SILVA, M. E. Fronteira e — vd. M. F. LARANJEIRA	
SILVEIRA, R. da — <i>Mécanismes de transfert à un nucléon</i>	93



Toute la correspondance concernant la rédaction de PORTUGALIAE PHYSICA doit être adressée à

PORTUGALIAE PHYSICA
Laboratório de Física da Faculdade de Ciências
LISBOA - 2 (Portugal)

Prix de l'abonnement: 250 escudos (US \$8.50) par volume
Prix des volumes déjà parus: 300 escudos (US \$10)
Prix du fascicule: 75 escudos (US \$2.50)

Les membres de la «Sociedade Portuguesa de Química e Física» ont une réduction de 50 % sur les prix indiqués.

Les Universités, les Laboratoires de Physique, les Académies, les Sociétés Scientifiques et les Revues de Physique sont invités à recevoir cette revue en échange de leurs publications.

PORTUGALIAE PHYSICA donnera un compte-rendu détaillé de tous les ouvrages soumis à la rédaction en deux exemplaires.

All mail concerning PORTUGALIAE PHYSICA to be addressed to:

PORTUGALIAE PHYSICA
Laboratório de Física da Faculdade de Ciências
LISBOA - 2 (Portugal)

Subscription rates: 250 escudos (US \$8.50) per volume
Price of past volumes: 300 escudos (US \$10)
Price of copy: 75 escudos (US \$2.50)

Members of the «Sociedade Portuguesa de Química e Física» may obtain *Portugaliae Physica* at a reduced price (50 %).

Universities, Physics Laboratories, Academies, Scientific Societies and Physics Publications are invited to receive this review in exchange for their publications.

PORTUGALIAE PHYSICA will give a detailed report of any book if two copies have been submitted.

PORTUGALIAE PHYSICA

VOLUME 5
FASCÍCULO 1/2
1 9 6 7 - 8

INSTITUTO DE ALTA CULTURA
CENTROS DE ESTUDOS DE FÍSICA DAS UNIVERSIDADES PORTUGUESAS

PORTUGALIAE PHYSICA

Fundadores: A. Cyrillo Soares, M. Telles Antunes, A. Marques da Silva,
M. Valadares.

VOLUME 5

1967-8

FASCÍCULO 1

VOLUMES PUBLICADOS :

Vol. 1 — 1943-45 — 326 pp.

Vol. 2 — 1946-47 — 256 pp.

Vol. 3 — 1949-54 — 173 pp.

Vol. 4 — 1965-66 — 304 pp.

Redacção: Laboratório de Física da Faculdade de Ciências — Lisboa-2
(PORTUGAL)

Comissão de redacção:

J. Moreira de Araújo — Carlos Braga
— Carlos Cacho — A. Pires de Car-
valho — M. Abreu Faro — J. Gomes
Ferreira — António Gião — F. Bra-
gança Gil — Manuel Laranjeira.

Amaro Monteiro — J. Pinto Peixoto
— J. da Providência — Lídia Sal-
gueiro — J. de Almeida Santos — José
Sarmento — António da Silveira —
J. Veiga Simão.

I N D I C E

(Table des matières)

<i>Le transfert de la chaleur et la non invariance relativiste des pressions. Le formalisme invariant de la mécanique non adiabatique des milieux continus, par ANTONIO BROTAS</i>	3
<i>The spurious states problem and an extension of the RPA, by J. DA PRO- VIDÊNCIA & C. M. SHAKIN</i>	31

CDU 53 (469) (05)

PORTUGALIAE PHYSICA

VOLUME 5

FASCÍCULO 1/2

1 9 6 7 - 8

112

POSTAL TELEGRAMS
PHYSICAL

1900
1901
1902

LE TRANSFERT DE LA CHALEUR ET LA NON INVARIANCE RELATIVISTE DES PRESSIONS. LE FORMALISME INVARIANT DE LA MECANIQUE NON ADIABATIQUE DES MILIEUX CONTINUS (*)

ANTÓNIO BROTAS (**)

RÉSUMÉ — On utilise une méthode élémentaire pour montrer que l'invariance relativiste des pressions, en général admise, n'est valable que dans les problèmes adiabatiques (flux de chaleur nul).

On présente les formules générales de transformation des tensions, dans les cas adiabatique et non adiabatique, et on développe, dans une bonne concordance avec ces formules, un formalisme invariant de la mécanique non adiabatique des milieux continus, généralisation du formalisme adiabatique usuellement présenté.

On montre que les formules proposées conduisent dans tous les cas à la formule de transformation $\Delta Q = \Delta Q_0 \sqrt{1 - \beta^2}$.

(Dans le cas particulier d'une surface traversée normalement par un flux q_0 , on propose $p = p_0 + \frac{q_0 v}{c^2}$ au lieu de $p = p_0$).

NOTATIONS — Dans ce texte le mot référentiel signifie toujours référentiel d'inertie.

Dans chaque référentiel nous adoptons un système de coordonnées où x^1, x^2, x^3 sont des coordonnées spatiales orthonormales et $x^4 = ct$.

$\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3, \vec{e}_4$ désignent les vecteurs unités associés au système considéré.

Quand nous parlons d'un référentiel K_0 et d'un autre référentiel K l'orientation des axes adoptée en K est celle qu'on obtient de l'orientation des axes de K_0 par une transformation de Lorentz sans rotation.

Les indices latins varient de 1 à 3.

Les indices grecs varient de 1 à 4.

(*) Reçu le 17 janvier 1968.

(**) Boursier de la Fondation Calouste Gulbenkian.
33, Av. Reille — Paris 14^{ème}.

I — INTRODUCTION

PLANCK a montré au commencement de la Relativité que la pression est un invariant relativiste [1]. Ce résultat assez souvent repris exige une certaine attention.

Si nous avons un corps C immobile dans le référentiel K_0 et nous considérons en K_0 les pressions dans les points de C (points de son intérieur ou de sa frontière) nous considérons des pressions sur des éléments de surface fixes en K_0 . Si nous étudions dans un autre référentiel K les pressions dans le même corps C , nous continuerons à considérer des pressions sur des éléments de surface liés au corps, mais, cette fois-ci, mobiles en K . Dans le référentiel K_0 les composantes des pressions sur trois plans convenablement choisis peuvent être présentées sous la forme des composantes d'un tenseur d'efforts à trois dimensions p_{ij} . Dans le référentiel K nous pouvons faire de même, les trois plans étant naturellement des plans liés au corps et en conséquence mobiles en K . Nous définissons ainsi en K le tenseur p^{ij} .

En K_0 les composantes du tenseur p_{ij} sont égales aux 9 composantes du tenseur impulsion-énergie d'indices variant de 1 à 3, mais cette égalité n'est vraie que dans le référentiel propre K_0 . Dans un autre référentiel K les composantes du tenseur de pressions p^{ij} sont en général différentes des composantes du tenseur impulsion-énergie (1).

Le résultat de PLANCK rappelé ci-dessous concerne seulement le cas particulier de la tension isotrope. Dans ce cas, localement, la pression sur une section avec une direction quelconque est normale et toujours la même, et on peut utiliser un scalaire pour la représenter. La tension étant isotrope en K_0 elle est aussi isotrope dans tout autre référentiel K ,

(1) Les composantes du tenseur impulsion-énergie d'indices variant de 1 à 3 sont aussi, quelquefois, désignées dans tous les référentiels par le nom de pressions et de cette double utilisation du même mot il résulte une certaine confusion. Dans ce texte nous employerons toujours le mot pression dans le premier sens.

et le scalaire qui représente la pression sur une section quelconque a la même valeur en K_0 et en K . C'est cela l'invariance des pressions. Dans le cas général, où il faut utiliser toutes les composantes de p_{ij} pour décrire l'état de tension dans un point, la situation est plus complexe et les tenseurs p_{ij} et p^{ij} ne sont pas égales. On peut même montrer que, tandis que p_{ij} est toujours symétrique, dans un référentiel K quelconque p^{ij} est en général asymétrique [2, 3].

L'invariance des pressions est souvent utilisée dans les problèmes de Mécanique pour déterminer dans des référentiels différents le travail fourni à un corps. Récemment [4], M. ARZELIÈS, dans un raisonnement tendant à établir la formule relativiste de transformation de la chaleur, a utilisé l'invariance des pressions pour le calcul d'un travail, ce qui l'a conduit à la formule

$$\Delta Q = \frac{\Delta Q_0}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad (I-1)$$

Ainsi il s'est trouvé en contradiction avec d'autres auteurs qui, par des voies différentes, arrivent à la loi de transformation

$$\Delta Q = \Delta Q_0 \sqrt{1-\beta^2} \quad (I-2)$$

M. R. PENNEY [5] a critiqué directement le texte [4], mais, dans les points où il est attaqué, le raisonnement de M. ARZELIÈS est irréprochable. En regardant de près cette question nous avons été amenés à penser que la seule erreur de M. ARZELIÈS est celle d'avoir utilisé l'invariance relativiste des pressions dans un problème de Thermodynamique. D'après les textes de PLANCK, VAN LAUE et MÖLLER, qui étudient la transformation des pressions à partir du formalisme de la mécanique des milieux continus, on constate que le problème qu'ils étudient est un problème purement mécanique où le transfert de chaleur est nul. Ce n'est pas le cas courant en Thermodynamique et notamment ce n'est pas le cas dans le problème envisagé par M. ARZELIÈS.

L'utilisation d'une méthode élémentaire [6] nous a permis de mettre en évidence l'influence du flux de chaleur sur la variation relativiste des pressions. Dans un cas simple où ce flux était différent de zéro nous avons montré que la pression n'était pas un invariant.

C'est le problème général de la transformation relativiste des pressions dans le cas non adiabatique qui est traité dans les pages qui suivent. Nous montrerons notamment que, en utilisant les formules correctes de transformation des pressions dans le cas non adiabatique, et en utilisant le même raisonnement de M. ARZELIÈS, on retrouve la formule $\Delta Q = \Delta Q_0 \sqrt{1 - \beta^2}$.

Nous avons deux voies pour aborder le problème. La première: partir du formalisme invariant de la Mécanique adiabatique des milieux continus, essayer de construire une extension valable pour le cas non adiabatique, établir ensuite les rapports entre les composants du tenseur impulsion-énergie, les pressions et le flux de chaleur (dans les différents référentiels). La seconde: continuer à utiliser la méthode élémentaire qui nous avait déjà apporté des résultats.

C'est la deuxième voie que nous avons adoptée. Nous avons montré d'abord que la méthode était valable pour résoudre n'importe quel problème adiabatique ou non adiabatique. Ensuite, les calculs étant très longs, sans changer les fondements de la méthode, nous avons cherché un processus de calcul plus commode à manipuler. Cela nous a permis d'écrire les formules générales de transformation des pressions et du flux de la chaleur et fait apparaître le tenseur impulsion-énergie. Ce n'est qu'à la fin que, guidés par des résultats déjà acquis, nous avons construit un formalisme invariant de la Mécanique non adiabatique des milieux continus, compatible dans le référentiel propre avec des équations établies directement à partir de la Physique Classique et des fondements de la Relativité, et extension naturel du formalisme adiabatique. Nous regardons la construction de ce formalisme comme une excellente confirmation des résultats auxquels nous étions arrivés auparavant.

II — UNE METHODE ELEMENTAIRE

Soit un corps immobile dans un référentiel K_0 . Considérons un élément de surface ΔS_0 lié au corps et normal à l'axe Ox . Admettons qu'un flux de chaleur q_0 traverse normalement ΔS_0 .

Dans l'intervalle Δt_0 la quantité de chaleur qui traverse ΔS_0 est:

$$\Delta Q_0 = \Delta S_0 q_0 \Delta t_0. \quad (\text{II-1})$$

ΔS_0 étant immobile en K_0 , l'énergie totale qui en K_0 traverse ΔS_0 dans l'intervalle Δt_0 est :

$$\Delta w_0 = \Delta Q_0. \quad (\text{II-2})$$

Pour représenter un corps dans ces conditions imaginons un modèle dans lequel le transport d'énergie est fait par une onde de vitesse c . Dans ce modèle nous avons à considérer le 4-vecteur V dont les composantes en K_0

$$V^\sigma = \left(\frac{\Delta w_0}{c}, 0, 0, \frac{\Delta w_0}{c} \right) \quad (\text{II-3})$$

représentent la quantité de mouvement et l'énergie (divisée par c) de la fraction d'onde qui traverse ΔS_0 en Δt_0 .

Dans le cas q_0 constant et uniforme sur ΔS_0 , la pression p_0 sur ΔS_0 due à l'onde est :

$$p_0 = \frac{\Delta w_0}{c \Delta S_0 \Delta t_0}. \quad (\text{II-4})$$

Introduisons un autre référentiel K , v étant la vitesse de K_0 par rapport à K . Les composantes en K du 4-vecteur V sont :

$$V^\sigma = \left(\frac{\Delta w_0 (1 + \beta)}{c \sqrt{1 - \beta^2}}, 0, 0, \frac{\Delta w_0 (1 + \beta)}{c \sqrt{1 - \beta^2}} \right); \quad \beta = \frac{v}{c}. \quad (\text{II-5})$$

Ces composantes représentent la quantité de mouvement et l'énergie (divisée par c) mesurées en K de la même fraction d'onde ci-dessus considérée.

L'élément de surface ΔS_0 fixe en K_0 mesure, en K , $\Delta S = \Delta S_0$ et l'événement de durée Δt_0 sur ΔS_0 en K_0 a, en K , une durée

$$\Delta t = \frac{\Delta t_0}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \Delta t_0 R^{-1}; \quad R = \sqrt{1 - \beta^2}. \quad (\text{II-6})$$

En K la quantité de mouvement

$$\Delta I = \frac{\Delta w_o (1 + \beta)}{c \sqrt{1 - \beta^2}} = \Delta w_o (1 + \beta) R^{-1} c^{-1} \quad (\text{II-7})$$

traverse l'élément de surface mobile ΔS dans l'intervalle Δt . La pression sur la surface mobile ΔS est donc :

$$p = \frac{\Delta w_o (1 + \beta) R^{-1}}{c \Delta t_o R^{-1} \Delta S_o} = p_o (1 + \beta) = p_o + \frac{v q_o}{c^2}. \quad (\text{II-8})$$

L'expression du premier principe $\Delta w = \Delta Q + \Delta \mathcal{Z}$ va nous permettre de définir en K la quantité de chaleur ΔQ et le flux q qui traversent l'élément de surface mobile ΔS .

L'énergie qui traverse ΔS sous forme de travail dans l'intervalle Δt est

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{Z} &= p \Delta S v \Delta t = \\ &= (p_o v + \beta^2 q_o) \Delta S_o \Delta t_o R^{-1} = \Delta Q_o (\beta + \beta^2) R^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{II-9})$$

L'énergie totale qui traverse ΔS (la quatrième composante de V multipliée par c) est

$$\Delta w = \Delta w_o (1 + \beta) R^{-1} ; \quad \Delta w_o = \Delta Q_o. \quad (\text{II-10})$$

Nous trouvons donc :

$$\Delta Q = \Delta w - \Delta \mathcal{Z} = \Delta Q_o \sqrt{1 - \beta^2} \quad (\text{II-11})$$

et nous pouvons encore définir :

$$q = \frac{\Delta Q}{\Delta S \Delta t} = q_o (1 - \beta^2). \quad (\text{II-12})$$

Soit maintenant le cas adiabatique. Prenons l'exemple simple d'un corps homogène, immobile en K_o , soumis à une tension uniforme qui se traduit par une pression p_o normale sur les sections perpendiculaires

à Ox et par des pressions nulles sur les sections parallèles à Ox . Pour représenter un corps dans ces conditions nous pouvons envisager un modèle dans lequel les éléments de surface normaux à Ox sont traversés en sens contraire par deux ondes égales de vitesse c , de direction de propagation parallèle à Ox .

Des calculs simples montrent que la pression p sur ΔS reste invariante dans une transformation de Lorentz parallèle à Ox , et que l'énergie sous forme de travail et l'énergie totale qui traversent ΔS en K sont égales. Nous avons donc $q_o = 0$ et $\Delta Q_o = 0$ en K_o , et $q = 0$ et $\Delta Q = 0$ en K .

Dans un cas plus complexe, pour traduire deux données initiales q_o et q_o arbitraires, nous pouvons imaginer un modèle formé par la superposition des deux modèles que nous venons d'étudier. Nous constatons immédiatement que dans une transformation de Lorentz parallèle à Ox la formule

$$p = p_o + \frac{v q_o}{c^2} \quad \left(p = p_o - \frac{v q_o}{c^2} \quad \begin{array}{l} \text{si } v \text{ et } q_o \text{ ont} \\ \text{sens contraires} \end{array} \right) \quad (\text{II-13})$$

et les formules (II-11) et (II-12) restent valables.

Nous pouvons vérifier que ces résultats, obtenus dans l'étude d'un modèle particulier, restent valables quels que soient les modèles relativistes considérés pour reproduire en K_o les données p_o et q_o . Admettons, par exemple, que, en K_o , l'élément ΔS_o est traversé normalement en sens contraire par des masses propres égales (et égales à m_o durant l'intervalle Δt_o) qui se déplacent avec les vitesses v_1 et v_2 . Nous avons à considérer les deux 4-vecteurs V_1 et V_2 dont les composantes en K_o sont :

$$V_1^j = (m_o v_1 R_1^{-1}, 0, 0, m_o c R_1^{-1}) \quad ;$$

$$R_1 = \sqrt{1 - \beta_1^2} \quad ; \quad \beta_1 = \frac{v_1}{c}$$

(II-14)

$$V_2^j = (-m_o v_2 R_2^{-1}, 0, 0, m_o c R_2^{-1}) \quad ;$$

$$R_2 = \sqrt{1 - \beta_2^2} \quad ; \quad \beta_2 = \frac{v_2}{c}$$

Soit les données initiales p_o et q_o . Il faut alors que les deux équations

$$q_o = \frac{c^2 m_o (R_1^{-1} - R_2^{-1})}{\Delta t_o \Delta S_o} \quad (\text{II-15})$$

$$p_o = \frac{m_o v_1 R_1^{-1} + m_o v_2 R_2^{-1}}{\Delta t_o \Delta S_o}$$

soient satisfaites. On voit qu'on peut définir arbitrairement la valeur d'une des trois inconnues et déterminer celles des deux autres.

En K , les composantes des deux 4-vecteurs sont :

$$\begin{aligned} V_1^j &= (m_o(v_1 + v)R_1^{-1}R^{-1}, 0, 0, (m_o c + m_o v_1 \beta)R_1^{-1}R^{-1}) \\ V_2^j &= (m_o(v_2 - v)R_2^{-1}R^{-1}, 0, 0, (m_o c - m_o v_2 \beta)R_2^{-1}R^{-1}). \end{aligned} \quad (\text{II-16})$$

Le sens physique de ces composantes est clair. La pression sur l'élément de surface mobile ΔS est :

$$p = \frac{(m_o v_1 + m_o v)R_1^{-1}R^{-1} + (m_o v_2 - m_o v_1)R_2^{-1}R^{-2}}{\Delta S_o \Delta t_o R^{-1}} \quad (\text{II-17})$$

En utilisant les relations géométriques $\Delta S = \Delta S_o$ et $\Delta t = \Delta t_o R^{-1}$ et les relations (II-15) nous retrouvons (II-13). De même, compte tenu du premier principe, nous retrouvons (II-12). Ces résultats sont donc indépendants des vitesses des ondes considérées.

*
* * *

La méthode que nous venons d'utiliser dans un cas simple peut être appliquée dans n'importe quel problème de transformation des pressions, adiabatique ou non adiabatique.

Dans le cas général nous avons à considérer comme données un tenseur d'efforts p_o^{ij} , un flux \vec{q}_o et une vitesse relative \vec{v} quelconques. Pour introduire le flux \vec{q}_o dans un modèle nous pouvons envisager, soit une onde de vitesse c (parallèle à \vec{q}_o), soit deux ondes de vitesses \vec{v}_1 et \vec{v}_2 (aussi parallèles à \vec{q}_o) qui transportent à travers ΔS_o et en sens contraire des masses propres égales. L'onde ou les ondes considérées introduisent un tenseur d'efforts $p_o'^{ij}$ (variable selon la solution adoptée). Pour introduire le tenseur $p_o''^{ij} = p_o^{ij} - p_o'^{ij}$ qui manque, nous pouvons considérer des paires d'ondes égales mais en sens contraire, avec des vitesses de propagation parallèles aux trois directions principales (orthogonales entre elles) du tenseur $p_o''^{ij}$. Nous pouvons donc, dans tous les cas, et de plusieurs façons, construire des modèles qui reproduisent les données du problème en K_o .

Pour simplifier les calculs et l'exposé, choisissons l'axe Ox avec la direction de \vec{v} . Il nous faut étudier du point de vue relativiste un certain nombre d'ondes. Soit une de ces ondes. Pour commodité, choisissons encore les axes Oy et Oz de façon que la vitesse \vec{v}_1 de propagation de l'onde soit parallèle au plan yOx . Soit

$$\vec{v}_1 = v_1 \cos \Theta \vec{e}_{o_1} + v_1 \sin \Theta \vec{e}_{o_2} \quad v_1 = |\vec{v}_1|. \quad (\text{II-18})$$

En K_o la direction de propagation de l'onde est normal au plan CB mais elle ne l'est plus en K (fig. 1).

Dans le cas d'une onde de vitesse $v_1 = c$ les composantes, en K_o , du 4-vecteur qui représente la quantité de mouvement et la masse qui traversent dans l'intervalle Δt_o l'élément ΔS_o (qui se trouve sur CB sur la figure 1), sont :

$$V^\sigma = \left(\frac{\Delta w_o}{c} \cos \Theta, \frac{\Delta w_o}{c} \sin \Theta, 0, \frac{\Delta w_o}{c} \right) \quad (\text{II-19})$$

Dans le cas d'une onde de vitesse $v_1 \neq c$ ces composantes deviennent :

$$V^\sigma = \left(\frac{m_o v_1 \cos \Theta}{\sqrt{1 - \beta_1^2}}, \frac{m_o v_1 \sin \Theta}{\sqrt{1 - \beta_1^2}}, 0, \frac{m_o c}{\sqrt{1 - \beta_1^2}} \right); \beta_1 = \frac{v_1}{c} \quad (\text{II-20})$$

Etant donné un plan quelconque (CD par exemple), nous pouvons déterminer sur ce plan un élément de surface $\Delta S'_0$ traversé dans l'intervalle Δt_0 par les mêmes quantités de masse et d'impulsion que ΔS_0 . L'impulsion qui traverse $\Delta S'_0$ divisée par Δt_0 et par l'aire $\Delta S'_0$ donne la pression due à l'onde considérée sur ce deuxième plan.

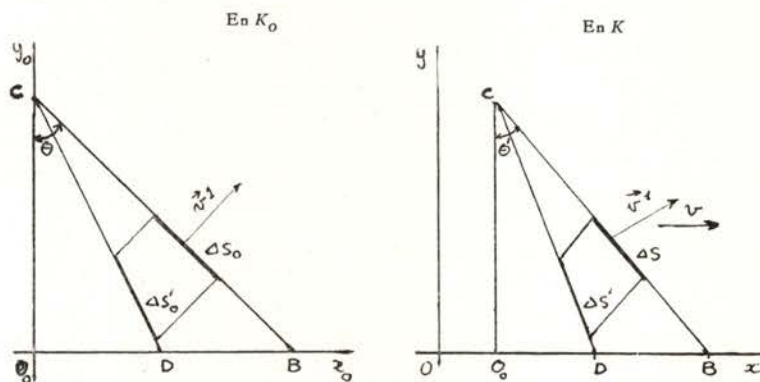


Fig. 1

En K les éléments de surface ΔS_0 et $\Delta S'_0$ sont mobiles, mais ils continuent à être traversés par des quantités de masse et d'impulsion égales. Puisque nous savons déterminer les composantes en K du 4-vecteur V et la géométrie en K des éléments mobiles ΔS_0 et $\Delta S'_0$ (nous les désignons en K dans une configuration $t = \text{const.}$ par ΔS et $\Delta S'$) nous pouvons déterminer la pression en K sur l'élément de surface mobile $\Delta S'$. Il nous suffit de diviser l'impulsion qui traverse $\Delta S'$ par Δt et par l'aire de $\Delta S'$.

Pour l'ensemble d'un modèle il suffit de faire le calcul pour toutes les ondes que nous avons considéré initialement pour traduire les données initiales p_o^{ij} et \vec{p}_o en K_o .

Des calculs simples mais longs permettent d'énoncer les conclusions suivantes:

- 1) Les formules de transformation des pressions et des flux obtenues sont indépendantes des modèles utilisés;
- 2) La formule

$$\Delta Q = \Delta Q_o \sqrt{1 - \beta^2}$$

(ΔQ_0 quantité de chaleur qui traverse en K_0 dans un intervalle Δt_0 un élément de surface ΔS_0 immobile en K_0 , et ΔQ quantité de chaleur qui traverse en K le même élément de surface dans l'intervalle $\Delta t = \Delta t_0 R^{-1}$ qui correspond à Δt_0) est vraie dans tous les cas;

3) Etant donné un élément de volume d'un corps immobile en K_0 , en repos sous la seule action des tensions intérieures, la résultante de toutes les forces de pression sur sa surface est aussi nulle dans le référentiel K . C'est ce fait qui permet l'utilisation d'un tenseur à trois dimensions pour décrire l'état de tension en K . (Il suffit de déterminer la pression en K sur trois plans pour pouvoir déterminer à partir de ces valeurs la pression sur un plan quelconque);

4) Dans les conditions précédentes, le moment par rapport à un point de toutes les forces de pression sur la surface du volume considéré n'est pas en général nul dans le référentiel K . Ce fait se traduit par la non-symétrie du tenseur d'efforts en K ;

5) Il est toujours possible d'exprimer le transfert de la chaleur en K par un vecteur flux tridimensionnel \vec{q} ;

L'égalité de \vec{q} à zéro dans un référentiel quelconque entraîne l'égalité à zéro dans tous les autres référentiels. Le caractère adiabatique d'une transformation est donc indépendant du référentiel où les observations ont lieu;

6) Dans les problèmes adiabatiques ($\vec{q}_0 = 0$) les composantes normales des pressions sont invariantes.

Un élément de surface fixe en K_0 et mobile en K a en général des orientations différentes dans les deux référentiels. Soient \odot_0 et \odot les orientations en K_0 et K . C'est la composante normale de la pression qui s'exerce en K sur le plan mobile \odot qui est égale à la composante normale de la pression qui s'exerce en K_0 sur le plan fixe \odot_0 .

C'est celui-ci le contenu précis de l'expression un peu vague: l'invariance relativiste des pressions. Ce résultat est seulement vrai dans le cas adiabatique et il ne concerne pas les composantes tangentielles des pressions qui, même dans le cas adiabatique, ne sont pas en général invariantes.

*
* *
*

Sans reproduire les calculs, nous indiquons encore quelques résultats particuliers :

Exemple d'un cas non adiabatique :

En K_o (onde normal à un plan CD parallèle à Oz):
vecteur normal au plan CD :

$$\vec{n}_o = \cos \Theta \vec{e}_{o_1} + \sin \Theta \vec{e}_{o_2}$$

pression sur le plan CD :

$$\begin{cases} \text{comp. normale} = p_o \\ \text{comp. tang.} = 0 \end{cases}$$

pression sur les plans parallèles à \vec{n}_o : 0

vecteur flux :

$$\vec{q}_o = q_o \cos \Theta \vec{e}_{o_1} + q_o \sin \Theta \vec{e}_{o_2} ; \quad q_o = |\vec{q}_o| = p_o c$$

pression sur le plan yOz :

$$\vec{p}_{yOz} = p_o \cos^2 \Theta \vec{e}_{o_1} + p_o \cos \Theta \sin \Theta \vec{e}_{o_2}$$

pression sur le plan xOz :

$$\vec{p}_{xOz} = p_o \cos \Theta \sin \Theta \vec{e}_{o_1} + p_o \sin^2 \Theta \vec{e}_{o_2}$$

tenseur d'efforts :

$$p_o^{ij} = \begin{vmatrix} p_o \cos^2 \Theta & p_o \cos \Theta \sin \Theta & 0 \\ p_o \cos \Theta \sin \Theta & p_o \sin^2 \Theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

En K (v vitesse de K_o par rapport à K parallèle à \vec{e}_1 avec même sens)
angle de CD (mobil) avec Oy : Θ'

$$\text{tang } \Theta' = \text{tang } \Theta . R$$

vecteur normal à CD :

$$\vec{n} = \cos \Theta' \vec{e}_1 + \sin \Theta' \vec{e}_2$$

pression sur le plan yOz :

$$\vec{p}_{yOz} = p_o (\cos^2 \Theta + \beta \cos \Theta) \vec{e}_1 + p_o (\cos \Theta \sin \Theta R^{-1} + \beta \sin \Theta R^{-1}) \vec{e}_2$$

pression sur le plan xOz :

$$\vec{p}_{xOz} = p_o (\cos \Theta \sin \Theta R) \vec{e}_1 + p_o \sin^2 \Theta \vec{e}_2$$

pression sur le plan CD :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{comp. normal} = p_o + p_o \frac{\cos^2 \Theta'}{\cos \Theta} \\ \text{comp. tang.} = p_o \beta \frac{\sin \Theta' \cos \Theta'}{\cos \Theta} \end{array} \right.$$

tenseur d'efforts:

$$p^{ij} = \begin{vmatrix} p_o (\cos^2 \Theta + \beta \cos \Theta) & p_o (\cos \Theta \sin \Theta R^{-1} + \beta \sin \Theta R^{-1}) & 0 \\ p_o \cos \Theta \sin \Theta R & p_o \sin^2 \Theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

vecteur flux:

$$\vec{q} = (\cos \Theta (1 - \beta^2) \vec{e}_1 + \sin \Theta \sqrt{1 - \beta^2} \vec{e}_2) q_o$$

Exemple d'un cas adiabatique

En K_o (deux ondes normales à CD égales mais en sens contraire):

vecteur normal au plan CD :

$$\vec{n}_o = \cos \Theta \vec{e}_{o_1} + \sin \Theta \vec{e}_{o_2}$$

pression sur le plan CD :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{comp. normale} = p_o \\ \text{comp. tang.} = 0 \end{array} \right.$$

pression sur les plans parallèles à n_o : 0

vecteur flux: 0

pression sur le plan $y O z$:

$$\vec{p}_{y O z} = p_o \cos^2 \Theta \vec{e}_{o_1} + p_o \sin \Theta \cos \Theta \vec{e}_{o_2}$$

pression sur le plan $x O z$:

$$\vec{p}_{x O z} = p_o \cos \Theta \sin \Theta \vec{e}_{o_1} + p_o \sin^2 \Theta \vec{e}_{o_2}$$

tenseur d'efforts:

$$p_o^{ij} = \begin{vmatrix} p_o \cos^2 \Theta & p_o \cos \Theta \sin \Theta & 0 \\ p_o \cos \Theta \sin \Theta & p_o \sin^2 \Theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

En K

vecteur normal à CD :

$$\vec{n} = \cos \Theta' \vec{e}_1 + \sin \Theta' \vec{e}_2$$

pression sur le plan $y O z$:

$$\vec{p}_{y C z} = p_o \cos^2 \Theta \vec{e}_1 + p_o \cos \Theta \sin \Theta R^{-1} \vec{e}_2$$

pression sur le plan $x O z$:

$$\vec{p}_{x O z} = p_o \cos \Theta \sin \Theta R \vec{e}_1 + p_o \sin^2 \Theta \vec{e}_2$$

pression sur le plan CD :

$$\begin{cases} \text{comp. normale} = p_o \\ \text{comp. tang.} = 0 \\ \text{pression total} = p_o \cos \Theta' \vec{e}_1 + p_o \sin \Theta' \vec{e}_2 \end{cases}$$

tenseur d'efforts:

$$p^{ij} = \begin{vmatrix} p_o \cos^2 \Theta & p_o \cos \Theta \sin \Theta R^{-1} & 0 \\ p_o \cos \Theta \sin \Theta R & p_o \sin^2 \Theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Nous notons l'invariance des composantes normales des pressions sur CD , yOz et xOz et la non invariance des composantes tangentielles sur yOz et xOz .

*
* *
*

Le résultat indiqué en 1) nous fait croire que la méthode utilisée est bien valable dans cette étude de la transformation relativiste des pressions. Dans le cas adiabatique les résultats auxquels nous arrivons sont en parfaite concordance avec les résultats présentés par les différents auteurs qui étudient ce problème par une voie aujourd'hui classique qui a pour base le formalisme invariant de la Mécanique adiabatique des milieux continus. Ici, avant de nous être occupé de l'établissement d'un formalisme mathématique invariant, nous avons déjà appris à calculer les valeurs des pressions dans n'importe quel référentiel y compris dans le cas non adiabatique.

Nous verrons par la suite que ces résultats sont en bonne concordance avec un formalisme de la Mécanique non adiabatique des milieux continus, prolongement naturel de la Mécanique adiabatique usuellement présentée.

III — INTRODUCTION D'UN FORMALISME TENSORIEL

Le procédé que nous venons d'exposer a l'avantage d'explicitier ce qu'est la pression et le flux de la chaleur pour les observateurs d'un référentiel K quelconque, mais il exige des calculs longs et peu commodes. Nous y avons tenu compte à la fois de deux effets relativistes, un proprement mécanique, un autre géométrique, car, d'un côté, nous avons utilisé des formules de transformation des composantes d'un 4-vecteur, d'un autre nous avons déterminé l'orientation et l'aire de certains éléments de surface et la durée de certains événements dans des référentiels différents.

Nous voulons maintenant construire un instrument mathématique convenable pour rendre compte simultanément de ces deux effets. Pour

cela nous commencerons par introduire un 4-vecteur dont l'interprétation géométrique s'adapte fort bien à notre propos.

Soit un corps de volume V_0 immobile dans un référentiel K_0 . Nous définirons le 4-vecteur X dont les composantes en K_0 sont :

$$X^\mu = \left[0, 0, 0, \frac{c}{V_0} \right]. \quad (\text{III-1})$$

Dans un autre référentiel K les composantes de X s'écrivent :

$$X^\mu = \left[\frac{v^1}{V_0 \sqrt{1-\beta^2}}, \frac{v^2}{V_0 \sqrt{1-\beta^2}}, \frac{v^3}{V_0 \sqrt{1-\beta^2}}, \frac{c}{V_0 \sqrt{1-\beta^2}} \right] \quad (\text{III-2})$$

($\vec{v} = v^1 \vec{e}_1 + v^2 \vec{e}_2 + v^3 \vec{e}_3$ vitesse de K_0 par rapport à K).

En K , X^4/c est l'inverse du volume et X^i est l'inverse de la somme des produits des aires d'interception du corps avec un plan fixe en K et normal à \vec{e}_i par les durées des respectives interceptions.

Considérons maintenant un corps homogène sans interactions intérieures (ni pressions internes ni échanges internes d'énergie), immobile en K_0 , de masse M_0 et volume V_0 .

Nous pouvons introduire le 4-vecteur V dont les composantes en K sont :

$$V^\nu = \left[\frac{M_0 v^1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \frac{M_0 v^2}{\sqrt{1-\beta^2}}, \frac{M_0 v^3}{\sqrt{1-\beta^2}}, \frac{M_0 c}{\sqrt{1-\beta^2}} \right] \quad (\text{III-3})$$

Ces composantes représentent la quantité de mouvement et la masse (multipliée par c) du corps en K .

Nous pouvons maintenant construire le tenseur :

$$P^{\sigma\mu} = V^\sigma X^\mu. \quad (\text{III-4})$$

Ce tenseur est le tenseur impulsion-énergie, qui, dans le cas considéré (masse pure), est généralement présenté sous la forme :

$$P^{\sigma\mu} = \rho_o u^\sigma u^\mu \quad (\text{III-5})$$

$$\left(u^\sigma = \frac{dx^\sigma}{d\tau}; \quad u^i = \frac{v^i}{\sqrt{1-\beta^2}}; \quad u^4 = \frac{c}{\sqrt{1-\beta^2}} \right).$$

La décomposition $V^\sigma X^\mu$ indique clairement la signification physique des différents composantes de $P^{\sigma\mu}$. Dans un référentiel K quelconque P^{23} , par exemple, représente la quantité de mouvement dans la direction e_2 qui traverse dans l'unité de temps une surface unitaire fixe en K normal à e_3 . P^{43} est la masse multipliée par c qui dans l'unité de temps traverse la même surface. P^{34} est la densité de quantité de mouvement multipliée par c dans la direction e_3 .

Dans les cas plus complexes les composantes du tenseur impulsion-énergie gardent la signification physique que nous venons de voir dans ce cas particulièrement simple. Nous verrons en effet que, dans tous les cas, le tenseur impulsion-énergie peut être présenté comme la somme de produits de vecteurs V par des vecteurs X .

Soit l'exemple du modèle présenté dans la page 7. Dans ce modèle nous avons considéré une onde d'énergie Δw_o et de vitesse c qui traverse dans l'intervalle Δt_o l'élément de surface ΔS_o (normal à Ox). À cette onde nous avons fait correspondre le 4-vecteur V dont les composantes en K_o sont :

$$V^\sigma = \left(\frac{\Delta w_o}{c}, 0, 0, \frac{\Delta w_o}{c} \right). \quad (\text{III-6})$$

Nous ne pouvons pas parler du volume de cette onde dans son référentiel propre puisque sa vitesse est c , mais nous pouvons définir le 4-vecteur X qui lui est associé à partir de la signification de ses composantes dans un référentiel quelconque. En K_o , les composantes de ce 4-vecteur X sont :

$$X^\sigma = \left(\frac{1}{\Delta S_o \Delta t_o}, 0, 0, \frac{1}{\Delta S_o \Delta t_o} \right) \quad (\text{III-7})$$

À partir de V et X nous pouvons construire le tenseur

$$\begin{aligned}
 P^{\sigma\mu} = V^\sigma X^\mu &= \begin{vmatrix} \frac{\Delta w_o}{\Delta S_o \Delta t_o c} & 0 & 0 & \frac{\Delta w_o}{\Delta S_o \Delta t_o c} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\Delta w_o}{\Delta S_o \Delta t_o c} & 0 & 0 & \frac{\Delta w_o}{\Delta S_o \Delta t_o c} \end{vmatrix} = \\
 &= \begin{vmatrix} p_o & 0 & 0 & p_o \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ p_o & 0 & 0 & p_o \end{vmatrix}
 \end{aligned} \tag{III-8}$$

qui est la contribution de l'onde considérée pour le tenseur d'impulsion énergie total.

Dans le cas du modèle de page II-3 où la pression est due à deux ondes opposées et le flux de chaleur est nul, il nous faut considérer les deux vecteur V_1 et V_2 et les deux vecteur X_1 et X_2 dont les composantes en K_o sont:

$$\begin{aligned}
 V_1^\sigma &= \left(\frac{\Delta w_o}{c}, 0, 0, \frac{\Delta w_o}{c} \right) \\
 V_2^\sigma &= \left(-\frac{\Delta w_o}{c}, 0, 0, \frac{\Delta w_o}{c} \right)
 \end{aligned} \tag{III-9}$$

et

$$\begin{aligned}
 X_1 &= \left(\frac{1}{\Delta S_o \Delta t_o}, 0, 0, \frac{1}{\Delta S_o \Delta t_o} \right) \\
 X_2 &= \left(-\frac{1}{\Delta S_o \Delta t_o}, 0, 0, \frac{1}{\Delta S_o \Delta t_o} \right) \\
 &\left(p_o = \frac{2 w_o}{\Delta S_o \Delta t_o c} \right)
 \end{aligned} \tag{III-10}$$

La contribution de ces deux ondes pour un tenseur d'impulsion-énergie total est:

$$P^{\nu\mu} = V_1^\nu X_1^\mu + V_2^\nu V_2^\mu = \begin{vmatrix} p_o & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_o \end{vmatrix} \quad (\text{III-11})$$

Considérons maintenant le cas d'un corps homogène, immobile en K_o , de masse M_o et volume V_o soumis dans les sections parallèles à yOz à une pression normal p_o et traversé par un flux q_o parallèle à Ox . Si nous considérons un modèle relativiste où des ondes de vitesse c sont responsables pour la pression p_o et le flux q_o , le tenseur impulsion-énergie obtenu à partir de ce modèle sera:

$$P^{\nu\mu} = \begin{vmatrix} \frac{q_o}{c} & 0 & 0 & \frac{q_o}{c} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{q_o}{c} & 0 & 0 & \frac{q_o}{c} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} p_o - \frac{q_o}{c} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_o - \frac{q_o}{c} \end{vmatrix} + \quad (\text{III-12})$$

$$+ \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{M_o c^2}{V_o} - p_o \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{p_o}{c} & 0 & 0 & \frac{q_o}{c} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{q_o}{c} & 0 & 0 & p_o c^2 \end{vmatrix}$$

Les trois parcelles sont respectivement les contributions de l'onde responsable pour le flux q_o (onde qui provoque une pression égale à $\frac{q_o}{c}$), des deux ondes responsables pour la pression $p_o - \frac{q_o}{c}$, et de la partie matière pure (sans interactions internes) de masse égale à la différence entre la masse totale et la masse des ondes.

Nous avons vu que, pour traduire les données initiales p_o, q_o, ρ_o , le modèle indiqué n'était pas unique. D'autres modèles, avec des ondes

de vitesses différentes de c , sont aussi satisfaisantes. Si nous construisons le tenseur impulsion-énergie à partir d'un de ces modèles nous trouvons des vecteurs V et X différents des antérieurs et les termes qui apparaissent dans la composition du tenseur total sont différents, mais leur somme reste toujours la même. Ce résultat est général. Le tenseur impulsion-énergie, quelque soit le modèle relativiste considéré pour interpréter les données — état de tension, flux de chaleur et densité d'un corps dans le référentiel propre — reste le même. Des calculs fastidieux mais sans difficulté montrent que les composantes de ce tenseur dans le référentiel propre s'écrivent

$$P^{\sigma\mu} = \begin{vmatrix} p_o^{11} & p_o^{12} & p_o^{13} & \frac{q_o^1}{c} \\ p_o^{21} & p_o^{22} & p_o^{23} & \frac{q_o^2}{c} \\ p_o^{31} & p_o^{32} & p_o^{33} & \frac{q_o^3}{c} \\ \frac{q_o^1}{c} & \frac{q_o^2}{c} & \frac{q_o^3}{c} & \rho_o c^2 \end{vmatrix} \quad (\text{III-13})$$

$P^{\sigma\mu}$ étant dans toutes les cas donnés par une somme de produits $V^\nu X^\mu$, ses composantes dans un référentiel K quelconque [nous les déterminons facilement à partir de (III-13)] ont la même signification physique que dans le cas de la matière pure examiné auparavant.

C'est cette signification qui va nous permettre d'écrire les relations entre les composantes de $P^{\sigma\mu}$, le tenseur tridimensionnel d'efforts et le flux de chaleur dans un référentiel K quelconque.

P^{ij} étant la quantité de mouvement dans la direction \vec{e}_i qui traverse dans l'unité de temps une surface unitaire fixe en K et normal à \vec{e}_j , et P^{i4} étant la densité de quantité de mouvement multipliée par c dans la direction \vec{e}_i , la quantité de mouvement dans la direction \vec{e}_i qui traverse dans l'unité de temps une section unitaire normal à \vec{e}_j et mobile en K avec la vitesse \vec{v} sera

$$p^{ij} = P^{ij} - \frac{P^{i4} v^j}{c}. \quad (\text{III-14})$$

p^{ij} est donc la composante dans la direction \vec{e}_i de la pression sur la section considérée. Dans un simple changement de coordonnées spatiales les p^{ij} se transforment comme les composantes d'un tenseur. Cela nous permet de parler d'un tenseur tridimensionnel d'efforts.

Pour déterminer en K le flux de chaleur qui traverse les surfaces mobiles en K (fixes en \bar{K}_0) il nous faut connaître l'énergie totale et l'énergie sous forme de travail qui traversent ces surfaces.

p^{4i} étant l'énergie (dans le sens masse-énergie) divisée par c qui traverse dans l'unité de temps la surface unitaire fixe en K normale à \vec{e}_i , et P^{44} étant la densité d'énergie, l'énergie qui traverse la surface unitaire normal à \vec{e}_i , mobile avec la vitesse v , est

$$w^i = P^{4j} c - P^{44} v^j \quad (\text{III-15})$$

La pression sur cette surface étant p^{ij} , l'énergie qui la traverse dans l'unité de temps sous forme de travail est:

$$\tau^i = \sum_s p^{si} v^s = \sum_s \left(P^{si} v^s - \frac{P^{s4} v^i v^s}{c} \right) \quad (\text{III-16})$$

La fraction d'énergie qui dans l'unité de temps passe d'un côté à l'autre sous forme de chaleur est donc

$$\begin{aligned} q^i &= w^i - \tau^i = P^{4i} c - P^{44} v^i - \sum_s p^{si} v^s = \\ &= P^{4i} c - P^{44} v^i - \sum_s P^{si} v^s + \sum_s \frac{P^{s4} v^i v^s}{c}. \end{aligned} \quad (\text{III-17})$$

Dans une simple transformation de coordonnées spatiales les valeurs q^i se transforment comme les composantes d'un vecteur. Nous pouvons donc parler du vecteur (tridimensionnel) flux de chaleur dans un référentiel K : $\vec{q} = q^i \vec{e}_i$.

Les formules (III-14), (III-17), l'expression (III-13) et les formules de transformation des composantes des tenseurs à quatre dimen-

sions permettent d'établir aisément des rapports entre les valeurs des pressions et des flux de chaleur dans des référentiels différents. Les résultats coïncident avec ceux indiqués dans la section II. Entre les deux méthodes exposées il y a seulement une différence de technique mathématique, les fondements physiques restent les mêmes.

Nous n'avons considéré jusqu'ici que des corps homogènes soumis à des conditions uniformes et constantes, mais nous pouvons aussi bien envisager le cas des corps non-homogènes soumis à des conditions non uniformes et variables en les regardant, pendant des périodes très courtes, comme composés par des régions très petites. Les résultats précédents restent valables, peut-être avec la restriction que les variations ne soient pas trop brusques. Nous les utiliserons dans la section suivante où nous établirons le formalisme invariant de la Mécanique non adiabatique des milieux continus.

IV — LA MECANIQUE NON ADIABATIQUE DES MILIEUX CONTINUS

En Physique Classique les équations de la Mécanique des milieux continus s'écrivent :

$$\begin{aligned} a) \quad & \frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_r p^r = 0 \quad ; \quad p^r = \rho v^r \\ b) \quad & \rho \gamma^r + \partial_q p^{r q} = f^r \quad ; \quad p^{r q} = p^{q r} \end{aligned} \tag{IV-1}$$

(ρ densité; \vec{v} vitesse; $\vec{\gamma}$ accélération; $p^{r q}$ tenseur d'efforts intérieurs, \vec{f} densité de forces extérieures par unité de volume).

Quand $\vec{v} = 0$ ces équations peuvent être mises sous la forme :

$$\begin{aligned} a) \quad & \frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_r (\rho v^r) = 0 \\ b) \quad & \frac{\partial}{\partial t} (\rho v^r) + \partial_q p^{r q} = f^r \end{aligned} \tag{IV-2}$$

Ces dernières équations ne sont valables que dans le référentiel propre. Dans la première équation, simple équation de conservation de la masse, $\rho \vec{v}$ est un flux de masse. Dans la seconde, qui établit un rapport entre les forces et la variation de quantité de mouvement, $\rho \vec{v}$ est une densité de quantité de mouvement.

En Relativité les équations dans le référentiel propre usuellement présentées [7,8] sont:

$$\begin{aligned}
 a) \quad & \frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_r \left(\rho v^r - \frac{1}{c^2} p^{r q} v_q \right) = 0 \quad ; \quad v_a = -v^a \\
 b) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho v^r - \frac{1}{c^2} p^{r q} v_q \right) + \partial_q p^{r q} = f^r
 \end{aligned}
 \tag{IV-3}$$

Ces équations peuvent être établies à partir des équations (IV-2) et de l'équivalence relativiste entre masse et énergie. Cette équivalence oblige à introduire dans les équations a) et b) un flux de masse-énergie et une densité de mouvement dus à l'énergie transmise sous forme de travail. Nous faisons remarquer que les équations (IV-3) sont seulement valables dans le cas adiabatique où le transfert d'énergie sous forme de chaleur est nul.

Pour obtenir les équations relativistes valables dans un référentiel quelconque, on introduit usuellement un tenseur et un 4-vecteur dont les composantes dans le référentiel propre sont:

$$P^{* \sigma \mu} = \begin{vmatrix} P_o^{11} & P_o^{12} & P_o^{13} & 0 \\ P_o^{21} & P_o^{22} & P_o^{23} & 0 \\ P_o^{31} & P_o^{32} & P_o^{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}
 \tag{IV-4}$$

et

$$F^\sigma = (f_o^1, f_o^2, f_o^3, 0),$$

et on considère en suite l'équation invariante:

$$\partial_\mu (\rho_o u^\sigma u^\mu + P^{* \sigma \mu}) = F^\sigma \quad (\rho_o \text{ densité dans le référentiel propre})
 \tag{IV-5}$$

Si la condition:

$$\partial_q p^{r q} = \partial_q P^{* r q} \quad (\text{IV-6})$$

est vérifiée dans le référentiel propre, il est possible de montrer que, dans ce référentiel, l'équation (IV-5) s'identifie avec les équations (IV-3) [7,8].

Le tenseur

$$P^{\sigma \mu} = \rho_0 u^\sigma u^\mu + P^{* \sigma \mu}$$

coïncide avec le tenseur d'impulsion énergie que nous avons introduit dans la section antérieure. La relation

$$p^{ij} = P^{ij} - \frac{P^{i4} v^j}{c} \quad (\text{III-14})$$

que nous avons trouvée dans cette section entraîne dans le cas adiabatique la vérification de (IV-6) dans le référentiel propre. L'équation (IV-5) est donc l'équation invariante de la Mécanique adiabatique des milieux continus.

L'introduction de la condition (IV-6) n'est pas en général discutée. La formule (III-14) montre pourtant qu'elle est vérifiée dans le cas adiabatique, mais nullement dans le cas non adiabatique. C'est une relation différente de la relation (IV-6) qui va permettre la construction d'un formalisme invariant de la Mécanique non adiabatique des milieux continus.

Nous avons dit que les équations (IV-3) n'étaient valables que dans le cas adiabatique. Dans le cas non adiabatique, où on doit considérer le flux d'énergie transmis sous forme de chaleur, nous proposons, toujours dans le référentiel propre, les équations:

$$a) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_r \left(\rho v^r - \frac{1}{c^2} p^{r q} v_r \right) + \partial_r \frac{q^r}{c^2} = 0 \quad (\text{IV-7})$$

$$b) \quad \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho v^r - \frac{1}{c^2} p^{r q} v_q \right) + \partial_q p^{r q} + \partial_t \frac{q^r}{c^2} + \partial_s \left(\frac{v^s q^r}{c^2} \right) = f^r$$

Pour les établir nous nous sommes borné à considérer, outre le flux de masse et la densité de quantité de mouvement dûs à l'énergie

transmise sous forme de travail, le flux de masse et la densité de quantité de mouvement dûs à l'énergie transmise sous forme de chaleur.

L'introduction des termes $\partial_r \frac{q^r}{c^2}$ et $\partial_t \frac{q^r}{c^2}$ est simple, celle du terme $\partial_s \left(\frac{v^s q^r}{c^2} \right)$ deviendra plus claire quand nous écrirons l'équation (IV-7) sous une forme qui explicite mieux son contenu physique.

Partons de l'équation:

$$\frac{d}{dt} (\vec{p}^* \delta v) = \vec{f}^* \delta v \quad (\text{IV-8})$$

\vec{f}^* densité de force total qui s'exerce dans le volume δv .

\vec{f}^* est égale à la densité de force extérieure moins la divergence du tenseur d'efforts intérieurs.

$$f^{*q} = f^q - \partial_q p^{rq} \quad (\text{IV-9})$$

\vec{p}^* densité total de quantité de mouvement

$$p^{*r} = \rho v^r - \frac{1}{c^2} p^{rq} v_q + \frac{q^r}{c^2} \quad (\text{IV-10})$$

En développant les calculs et en divisant par δv nous trouvons dans le référentiel propre (IV-7b).

Pour établir les équations invariantes dans le cas non adiabatique nous conservons le même 4-vecteur F' et nous définissons le tenseur $P^{*\sigma\mu}$ par la formule:

$$P^{*\sigma\mu} = \begin{vmatrix} p_o^{11} & p_o^{12} & p_o^{13} & \frac{q_o^1}{c} \\ p_o^{21} & p_o^{22} & p_o^{23} & \frac{q_o^2}{c} \\ p_o^{31} & p_o^{32} & p_o^{33} & \frac{q_o^3}{c} \\ \frac{q_o^1}{c} & \frac{q_o^2}{c} & \frac{q_o^3}{c} & 0 \end{vmatrix} \quad (\text{IV-11})$$

dans le référentiel propre.

Le tenseur $P^{\sigma\mu} = \rho_0 u^\sigma u^\mu + P^{*\sigma\mu}$ coïncide aussi dans ce cas avec le tenseur impulsion-énergie défini dans la section antérieure. Nous avons démontré, outre la relation (III-14), la relation

$$q^j = P^{4j} c - P^{44} v^j - \sum_s p^{sj} v^s \quad (\text{III-17})$$

En utilisant ces deux relations nous allons montrer que, dans le référentiel propre, l'équation (IV-5) [$P^{*\sigma\mu}$ défini par (IV-11)] s'identifie avec les équations (IV-7).

Dans le référentiel propre nous avons:

$$u^i = 0 ; u^4 = c ; \partial_\lambda u^r = \partial_\lambda v^r ; \partial_\lambda u^4 = 0 \quad (\text{IV-12})$$

L'équation (IV-5) nous donne quatre équations qui, dans le référentiel propre, prennent la forme:

$$\text{a) } \rho_0 c \partial_r v^r + \partial_r P^{*4r} + c \frac{\partial \rho_0}{\partial t} + \partial_4 P^{*44} = 0 \quad (\text{IV-13})$$

$$\text{b) } \partial_q P^{*rq} + \rho_0 \frac{\partial v^r}{\partial t} + \partial_4 P^{*r4} = f^r$$

En faisant les substitutions (III-14) et (III-17) dans l'équation (IV-7a) nous trouvons:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_r \left(\rho v^r - \frac{1}{c^2} p^{rq} v_q \right) + \quad (\text{IV-7 a-1})$$

$$\frac{1}{c^2} \partial_r (P^{4r} c - P^{44} v^r - \sum_s p^{sr} v^s) = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_r (\rho v^r) + \frac{1}{c^2} \partial_r (P^{*4r} c + \quad (\text{IV-7 a-2})$$

$$\rho_0 u^4 u^r c - P^{*44} v^r - \rho_0 u^4 u^4 v^r) = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_r (\rho v^r) + \frac{1}{c} \partial_r P^{*4r} = 0 \quad (\text{IV-7 a-3})$$

Dans un référentiel quelconque la densité est donnée par

$$\rho c^2 = \rho_0 u^4 u^4 + P^{*44}$$

(dans le référentiel propre $\rho = \rho_0$). En faisant ces substitutions en (IV-7 a-3) nous trouvons (IV-13 a).

Pour l'équation (IV-7b), en faisant les mêmes substitutions, il vient successivement:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho v^r - \frac{1}{c^2} p^{r q} v^q \right) + \partial_q \left(P^{r q} - \frac{P^{r 4} v^q}{c} \right) + \tag{IV-7 b-1}$$

$$\frac{1}{c^2} \partial_t (P^{4 r} c - P^{44} v^r - \sum_s p^{s r} v^s) + \partial_s \left(\frac{v^s q^r}{c^2} \right) = f^r$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v^r) + \partial_q \left(P^{* \sigma \mu} + \rho_0 u^r u^q - \frac{P^{* r 4} v^q}{c} - \frac{\rho_0 u^r u^4 v^q}{c} \right) + \tag{IV-7 b-2}$$

$$\frac{1}{c^2} \partial_t (P^{* 4 r} c + \rho_0 u^4 u^r c - P^{* 44} v - \rho_0 u^4 u^4 v^r) + \frac{P^{* 4 r}}{c} \partial_s v^s = f^r$$

$$\partial_t (\rho v^r) + \partial_q P^{* r q} + \frac{1}{c^2} \partial_t P^{* 4 r} = f^r \tag{IV-7 b-3}$$

et nous retrouvons bien l'équation (IV-13b).

Les relations entre les composantes du tenseur impulsion-énergie, les pressions et les flux de chaleur dans des différents référentiels étant données par:

$$p^{ij} = P^{ij} - \frac{P^{i4} v^j}{c} \tag{III-14}$$

et

$$q^j = P^{4j} c - P^{44} v^j - \sum_s p^{sj} v^s \tag{III-17}$$

l'équation

$$\partial_{\mu}(P^{7\mu}) = \partial_{\mu}(\rho_0 u^{\sigma} u^{\mu} P^{*\sigma\mu}) = F^{\sigma} \quad (\text{IV-5})$$

(tenseur $P^{*\sigma\mu}$ défini par IV-11) est donc l'équation invariante de la Mécanique non adiabatique des milieux continus.

En faisant $q_0 = 0$ nous retrouvons comme cas particulier toutes les formules de la Mécanique adiabatique habituelle.

BIBLIOGRAPHIE

- (1) M. PLANK — *Berl. Ber.*, p. 542, 1907.
— *Ann. de Phys.*, 76, 1, 1908.
- (2) M. von LAUE — *La Théorie de la Relativité*, 1, p. 257, Paris, 1924, G. V.
- (3) MØLLER — *The Théorie of Relativity*, p. 177, Oxford, 1962.
- (4) H. ARZELIÈS — «Transformation relativiste de la température et de quelques autres grandeurs thermodynamiques», *Il Nuovo Cimento*, 35, p. 792, 1965.
— *Thermodynamique Relativiste et Quantique*, G. V. Paris.
- (5) R. PENNEY — «Note on Relativistic Thermodynamics», *Il Nuovo Cimento*, XLIII A, 4, p. 911, 1966.
- (6) A. BROTAS — *Sur la Transformation Relativiste de l'Énergie des Corps Étendus*, C. R. Paris, t. 265, p. 244 (1967).
— *Sur la Transformation Relativiste du Travail et de la Chaleur*, C. R. Paris, t. 265, p. 401, 1967.
- (7) M. A. TONNELAT — *Les Principes de la t. Electromagnetique et de la Relativité*, p. 187 (1959).
- (8) A. LICHNEROWICZ — *Eléments de Calcul Tensoriel*, A. Collin Paris, pp. 186-189.

THE SPURIOUS STATES PROBLEM AND AN EXTENSION OF THE RPA (*)

J. DA PROVIDÊNCIA

Laboratório de Física, Universidade de Coimbra, Portugal

C. M. SHAKIN

Laboratory for Nuclear Science and Physics Department
Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts

ABSTRACT— Corrections to RPA transition amplitudes arising from ground state correlations due to the zero point motion of the several degrees of freedom have been considered elsewhere. Since a complete set of states was required in the derivations the zero point motion of the spurious degrees of freedom was also involved in the expressions obtained for transition amplitudes. It is shown here that the contribution of the spurious states actually cancels out in those expressions if the transition operator commutes with collective operators such as center of mass position and total momentum.

1 — INTRODUCTION

Corrections to RPA transition amplitudes arising from ground state correlations have been considered in other papers (1, 2, 3). Those corrections involve spurious states. Corrections to one-phonon transition amplitudes, for instance, contain summations extending over all RPA bosons, which may be regarded as arising from the zero-point motion of the several degree of freedom. Since a complete set of states was required in the derivations, the so called spurious states had to be included in the summations. However, the exact center of

(*) Received the 21st February 1968.

mass and orientation wave packets are obviously unimportant for intrinsic excitations, so one expects the contribution of the spurious states to cancel out. In section 3 of the present note we show that this conjecture is realized to some extent by the formulae derived in ref. 1, which are valid up to first order in the ground state correlations. In section 4 we show quite generally that the spurious states may be discarded from the sums over intermediate states, provided the collective degrees of freedom are treated correctly. In section 2 we review some results of ref. 1 and we derive and correct other results which appear there without derivation.

2 — CORRECTIONS TO RPA TRANSITION AMPLITUDES

In the notation of FUKUDA *et al.* (4), the RPA equations are written as follows

$$(\omega_r + \varepsilon_i - \varepsilon_k) \Psi_{ik}^{(r)} = \Theta(ik) \sum_{jl} \hat{v}_{ij,kl} \Psi_{lj}^{(r)} \quad (2.1)$$

where

$$v_{ij,kl} = v_{ij,kl} - v_{il,jk} \quad (2.2)$$

is the antisymmetrized matrix element of the two-body effective interaction, the ε_i are the Hartree-Fock single particle energies and $\Theta(ik) = -\Theta(ki)$ may have the values 1, 0, -1. It is 1 if i is a hole and k is a particle. The eigensolutions of eq. (2.1) can be chosen to satisfy the following orthogonality and completeness relations, when ω_r and ω_s are positive,

$$\sum_{ik} \Psi_{ik}^{(r)} \Psi_{ik}^{(s)*} \Theta(ik) = \delta_{rs} \quad (2.3)$$

$$\sum_{ik} \Psi_{ik}^{(r)} \Psi_{ki}^{(s)} \Theta(ik) = 0 \quad (2.4)$$

$$\sum_r (\Psi_{ik}^{(r)} \Psi_{jl}^{(r)*} - \Psi_{ki}^{(r)*} \Psi_{lj}^{(r)}) = \delta_{ij} \delta_{kl} \Theta(ik) \quad (2.5)$$

In the following we will denote hole states by greek letters, $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \dots$, and we will use the latin letters m, n, p, q, \dots , as indices for particle states. The latin letters i, j, k, l, \dots , may denote either hole or particle states. If we represent by c_i the annihilation operator for the single particle state i , and if the symbol $|>$ stands for the absolute vacuum, the Hartree-Fock ground state is given by

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} |> \tag{2.6}$$

and the RPA groundstate may be written

$$|0_{RPA}\rangle \simeq \left(1 + \frac{1}{2} \sum_{m n \alpha \beta} \mathcal{C}_{m \alpha n \beta} c_m^{\dagger} c_{\alpha} c_n^{\dagger} c_{\beta} \right) |\Phi_0\rangle \tag{2.7}$$

where

$$\mathcal{C}_{m \alpha n \beta} \simeq \sum_s \Psi_{\alpha m}^{(s)*} \Psi_{n \beta}^{(s)} \tag{2.8}$$

In the RPA the matrix element of the operator $c_k^{\dagger} c_i$ between the ground state $|0\rangle$ and the excited state $|r\rangle$ is given by

$$\langle r | c_k^{\dagger} c_i | 0 \rangle_{RPA} = \Psi_{ik}^{(r)} \tag{2.9}$$

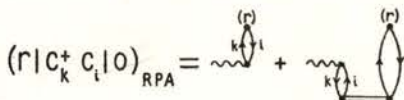


Fig. 1

This expression for the transition amplitude corresponds to the first two diagrams of fig. 1. The contribution of the diagrams of fig. 2 provides the following correction to eq. (2.9)

$$\Delta \langle r | c_k^{\dagger} c_i | 0 \rangle = - \sum_{gh} \left(\Psi_{gh}^{(r)} \overline{\square}_{gi;hk} + \frac{1}{2} \Psi_{ih}^{(r)} \overline{\square}_{kg;hg} + \frac{1}{2} \Psi_{hk}^{(r)} \overline{\square}_{hg;ig} \right) \tag{2.10}$$

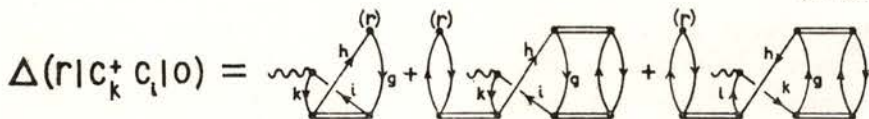


Fig. 2

where

$$\begin{aligned} \bar{\Delta}_{ik;jl} = & \frac{1}{2} (1 - \Theta(ik)) \sum_s \Psi_{ik}^{(s)*} \Psi_{jl}^{(s)} + \\ & + \frac{1}{2} (1 + \Theta(ik)) \sum_s \Psi_{ki}^{(s)} \Psi_{lj}^{(s)*} \end{aligned} \quad (2.11)$$

is a small quantity, at most of the order of the small amplitudes $\Psi_{m\alpha}^{(s)}$.

A proof of eq. (2.9) based on the Green function method is presented in ref. 1. An equivalent but simpler derivation of the same equation based on the two-particle-two hole structure of the RPA ground state as given by eq. (2.7) may be found in ref. 2 where the origin of the $(1/2)$ factors is explained.

In the RPA the quantity $\langle r | c_k^+ c_i | 0 \rangle$ is zero if $\Theta(ik)$ is zero. An expression for that matrix element of first order in the ground state correlations is provided by eq. (5.18) of ref. 1. Since that expression is not quite correct we will rederive it here following the method developed in ref. 2. We consider the diagrams of fig. 3 for the quan-

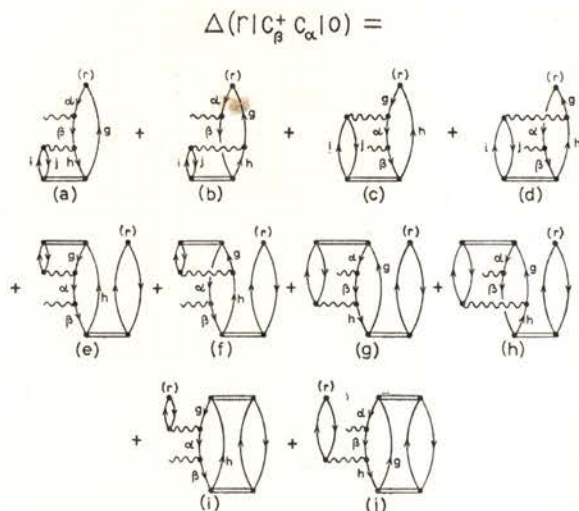


Fig. 3

tity $\langle r | c_\beta^+ c_\alpha | 0 \rangle$ (or, if we prefer, $\Delta(r | c_\beta^+ c_\alpha | 0)$ since $\langle r | c_\beta^+ c_\alpha | 0 \rangle_{\text{RPA}}$ is zero). With the conventions of ref. 2, the double-bar in those diagrams represents a factor of the form $\sum_s \Psi_{ik}^{(s)*} \Psi_{jl}^{(s)}$ arising from the two-particle-two-hole structure of the RPA ground state. The

diagrams (a), (b), (c) and (d), which contain only one double-bar, should be the most important ones. The diagrams (a) and (b) arise from a perturbation theory treatment of the admixture of one-phonon states into the ground state due to ground state correlations. This leads to a correction to the RPA transition amplitude $\langle r | D | 0 \rangle_{\text{RPA}}$ of the form

$$\Delta' \langle r | D | 0 \rangle = \sum_t \frac{\langle r | D | t \rangle \langle t | H | 0 \rangle}{E_0 - E_t} \quad (2.12)$$

In order to demonstrate in the next section the cancellation of the contributions of spurious states to sums like the one over s contained in the quantity $\overline{\sum}_{i k ; j l}$ which appears in eq. (2.10) it is convenient to leave one half of the contribution of the diagrams (a) and (b) in the form of eq. (2.12) and to transform the other half as follows. For half the contribution of the diagram (a) we may write

$$\Delta_a \langle r | c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} | 0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i j g h s} \frac{\Psi_{\alpha g}^{(r)} \hat{v}_{j h, i \beta} \Psi_{j i}^{(s)*} \Psi_{g h}^{(s)}}{-(\epsilon_g - \epsilon_{\beta} + \Delta)} \quad (2.13)$$

The intermediate state t of eq. (2.12) is here the particle-hole state, containing a particle g , a hole β and having an excitation energy equal to $(\epsilon_g - \epsilon_{\beta} + \Delta)$. The energy shift Δ is introduced in order to account roughly for the particle-hole interaction energy. Now we note that $\Psi_{g h}^{(s)}$ is a small quantity and eq. (2.1) suggests that its most important values are assumed when g and h are such that $-\omega_s \simeq \epsilon_g - \epsilon_h + \Delta$. Here, the quantity Δ is possibly about the same as previously. We now introduce a quantity $\sum_{ij}^{(s)}$ defined by

$$\begin{aligned} \sum_i^{(s)} &= \frac{1}{\omega_s + \epsilon_i - \epsilon_j} \sum_{k l} \hat{v}_{i k, j l} \Psi_{i j}^{(s)} \quad \text{if} \quad \Theta(i j) = 0 \\ \sum_{i j}^{(s)} &= 0 \quad \text{if} \quad \Theta(i j) \neq 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

Then we can write for half the contribution of diagram (a)

$$\begin{aligned} \Delta_a \langle r | c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} | 0 \rangle &\simeq \frac{1}{2} \sum_{g h i j s} \frac{\Psi_{\alpha g}^{(r)} \hat{v}_{j h, i \beta} \Psi_{j i}^{(s)*} \Psi_{g h}^{(s)}}{\omega_s + \epsilon_{\beta} - \epsilon_h} \\ &\simeq \frac{1}{2} \sum_{g h s} \Psi_{\alpha g}^{(r)} \sum_{\beta h}^{(s)} \Psi_{g h}^{(s)} \end{aligned} \quad (2.15)$$

For half the contribution of diagram (b) we obtain in a similar way

$$\begin{aligned}
 \Delta_b(r | c_\beta^+ c_\alpha | 0) &\simeq -\frac{1}{2} \sum_{g h i j s} \frac{\Psi_{\alpha g}^{(r)} \hat{v}_{g j, h i} \Psi_{j i}^{(s)*} \Psi_{h \beta}^{(s)}}{-(\varepsilon_g - \varepsilon_\beta + \Delta)} \\
 &\simeq -\frac{1}{2} \sum_{g h i j s} \frac{\Psi_{\alpha g}^{(r)} \hat{v}_{g j, h i} \Psi_{j i}^{(s)*} \Psi_{h \beta}^{(s)}}{\omega_s + \varepsilon_h - \varepsilon_g} \quad (2.16) \\
 &\simeq -\frac{1}{2} \sum_{g h s} \Psi_{\alpha g}^{(r)} \int_{h g}^{(s)*} \Psi_{h \beta}^{(s)}
 \end{aligned}$$

since, presumably, the most significant values of the small quantity $\Psi_{h \beta}^{(s)}$ are assumed when β and h are such that $-\omega_s \simeq \varepsilon_h - \varepsilon_\beta + \Delta$.

The admixture of two-phonon states into one-phonon states gives rise to a correction to the RPA transition amplitude $(r | D | 0)_{\text{RPA}}$ of the form

$$\Delta''(r | D | 0) = \sum_{s t} \frac{(r | H | s t) (s t | D | 0)}{E_r - E_s - E_t} \quad (2.17)$$

Diagrams (c) and (d) of fig. 3 take this effect into account. The contribution of diagram (c) may be written

$$\Delta_c(r | c_\beta^+ c_\alpha | 0) \simeq \sum_{i j g h} \frac{\Psi_{g h}^{(r)} \hat{v}_{j \alpha, i g} \Psi_{h \beta}^{(s)} \Psi_{j i}^{(s)*}}{\omega_r - \omega_s - (\varepsilon_h - \varepsilon_\alpha + \Delta)} \quad (2.18)$$

where $(\varepsilon_h - \varepsilon_\alpha + \Delta)$ is the energy of phonon t consisting of a hole α and a particle h . We assume that we may write approximately $\omega_r \simeq \varepsilon_h - \varepsilon_g + \Delta$, if h, g are the labels for which $\Psi_{g h}^{(r)}$ is most important. Then we have

$$\begin{aligned}
 \Delta_c(r | c_\beta^+ c_\alpha | 0) &\simeq \sum_{i j g h s} \frac{\Psi_{g h}^{(r)} \hat{v}_{j \alpha, i g} \Psi_{h \beta}^{(s)} \Psi_{j i}^{(s)*}}{-(\omega_s + \varepsilon_g - \varepsilon_\alpha)} \\
 &\simeq -\sum_{g h} \Psi_{g h}^{(r)} \int_{g \alpha}^{(s)*} \Psi_{h \beta}^{(s)}
 \end{aligned} \quad (2.19)$$

As for diagram (d) we obtain in a similar way

$$\begin{aligned} \Delta_d(r | c_\beta^+ c_\alpha | 0) &\simeq - \sum_{g h i s} \frac{\Psi_{\alpha g}^{(r)} \hat{v}_{g j, g i} \Psi_{j i}^{(s)*} \Psi_{h \beta}^{(s)}}{\omega_r - \omega_s - (\varepsilon_h - \varepsilon_\alpha + \Delta)} \\ &\simeq - \sum_{g h i j s} \frac{\Psi_{\alpha g}^{(r)} \hat{v}_{g j, h i} \Psi_{j i}^{(s)*} \Psi_{h \beta}^{(s)}}{-\omega_s + \varepsilon_g - \varepsilon_h} \\ &\simeq - \sum_{g h s} \Psi_{\alpha g}^{(r)} \int_{g h}^{(s)*} \Psi_{h \beta}^{(s)} \end{aligned} \quad (2.20)$$

where we have assumed

$$\omega_r \simeq \varepsilon_g - \varepsilon_\alpha + \Delta.$$

Notice that diagram (d) is partially canceled by diagram (b). The contribution of the four diagrams (a), (b), (c) and (d), which should be the most important ones, is

$$\begin{aligned} \Delta_{abcd}(r | c_\beta^+ c_\alpha | 0) &= \\ &= \sum_{g h s} \left[\frac{1}{2} (\Psi_{\alpha g}^{(r)} \int_{\beta h}^{(s)*} \Psi_{g h}^{(s)} + \Psi_{\alpha g}^{(r)} \int_{h g}^{(s)*} \Psi_{h \beta}^{(s)}) - \right. \\ &\quad \left. - \Psi_{g h}^{(s)} \int_{g \alpha}^{(s)*} \Psi_{h \beta}^{(s)} \right] + \frac{1}{2} \sum_t (r | c_\beta^+ c_\alpha | t) a^{(t)} \end{aligned} \quad (2.21)$$

where (3)

$$(r | c_i^+ c_j | s) \simeq \sum_k (\Psi_{j k}^{(r)} \Psi_{i k}^{(s)*} + \Psi_{k i}^{(r)} \Psi_{k j}^{(s)*}) \Theta(k j) \quad (2.21-a)$$

(when $\Theta(i j) = 0$)

$$a^{(t)} = - \frac{1}{\omega_t} (t | H | 0)$$

$$\simeq \frac{1}{\omega_t} \sum \Psi_{\beta g}^{(t)} \Psi_{j i}^{(s)*} (\hat{v}_{j h, i \beta} \Psi_{g h}^{(s)} - \hat{v}_{j g, i h} \Psi_{h \beta}^{(s)}) \quad (2.21-b)$$

the sum being over repeated indices. The quantities $a^{(t)}$ are small, of the order of magnitude of $(\Psi_{m \alpha}^{(t)})^2$, and have the following interpretation. They correspond to the one-phonon components we must add to the

RPA vacuum as given by eq. (2.7) in order to achieve stability against admixture with one-phonon states (3).

For completeness we give now the contribution of all the diagrams of fig. 3.

$$\begin{aligned} \Delta(r | c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} | 0) \simeq & \sum_{g h s} \left[\frac{1}{2} (\Psi_{g g}^{(r)} \Psi_{g h}^{(s)} \sum_{\beta h}^{(s)*} + \Psi_{\alpha g}^{(r)} \sum_{h g}^{(s)*} \Psi_{h \beta}^{(s)}) - \right. \\ & - \sum_{g \alpha}^{(s)*} \Psi_{g h}^{(r)} \Psi_{h \beta}^{(s)} + \frac{1}{2} (\sum_{\alpha g}^{(s)} \Psi_{h g}^{(s)*} \Psi_{h \beta}^{(r)} + \Psi_{g \alpha}^{(s)*} \sum_{g h}^{(s)} \Psi_{h \beta}^{(r)}) - \\ & - \Psi_{g \alpha}^{(s)*} \Psi_{g h}^{(r)} \sum_{h \beta}^{(s)} + \sum_{\alpha g}^{(r)} \Psi_{h g}^{(s)*} \Psi_{h \beta}^{(s)} - \Psi_{g \alpha}^{(s)*} \Psi_{g h}^{(s)} \sum_{h \beta}^{(r)} \left. \right] + \quad (2.22) \\ & + \frac{1}{2} \sum_t ((r | c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} | t) a^{(t)} + a^{(t)*} (r t | c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} | 0)). \end{aligned}$$

$$\Delta(r | c_m^{\dagger} c_n | 0) =$$

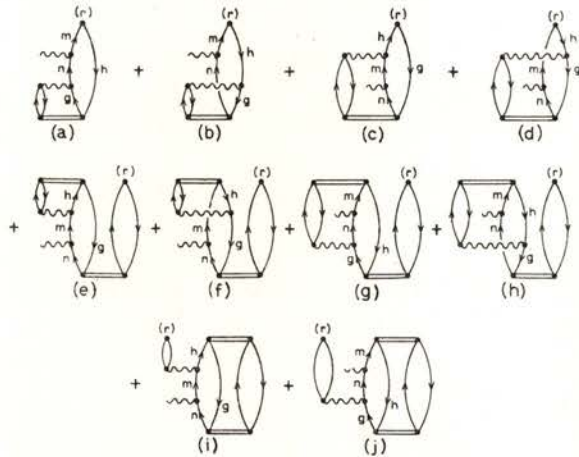


Fig. 4

The contribution of diagrams (a), (b), (c) and (d) of fig. 4, which are there the most important ones, comes out, after analogous manipulations,

$$\begin{aligned} \Delta_{abcd}(r | c_m^{\dagger} c_n | 0) \simeq & \sum_{g h s} \left[\frac{1}{2} (\Psi_{h m}^{(r)} \sum_{g n}^{(s)*} \Psi_{g h}^{(s)} + \right. \\ & + \Psi_{h m}^{(r)} \sum_{h g}^{(s)*} \Psi_{n g}^{(s)}) - \Psi_{g h}^{(r)} \sum_{m h}^{(s)*} \Psi_{n g}^{(s)} \left. \right] + \frac{1}{2} \sum_t (r | c_m^{\dagger} c_n | t) a^{(t)} \quad (2.23) \end{aligned}$$

and the contribution of all the diagrams of fig. 4 is

$$\begin{aligned} \Delta (r | c_m^+ c_n | 0) \simeq & \sum_{ghs} \left[\frac{1}{2} (\Psi_{hm}^{(r)} \sum_{gn}^{(s)*} \Psi_{gh}^{(s)} + \Psi_{hm}^{(r)} \sum_{hg}^{(s)*} \Psi_{ng}^{(s)}) - \right. \\ & - \Psi_{gh}^{(r)} \sum_{mh}^{(s)*} \Psi_{ng}^{(s)} + \frac{1}{2} (\Psi_{ng}^{(r)} \Psi_{hg}^{(s)*} \sum_{hm}^{(s)} + \Psi_{ng}^{(r)} \sum_{gh}^{(s)} \Psi_{mh}^{(s)*}) - \\ & - \sum_{ng}^{(s)} \Psi_{gh}^{(r)} \Psi_{mh}^{(s)*} + \Psi_{ng}^{(s)} \Psi_{hg}^{(s)*} \sum_{hm}^{(r)} - \sum_{ng}^{(r)} \Psi_{gh}^{(s)} \Psi_{mh}^{(s)*} \left. \right] + \\ & + \frac{1}{2} \sum_t [(r | c_m^+ c_n | t) a^{(t)} + (rt | c_m^+ c_n | 0) a^{(t)*}] \end{aligned} \quad (2.24)$$

We observe that eqs. (2.22) and (2.24) replace eq. (5.19) of ref. 1, where the terms in $a^{(t)}$ are missing and also some of the remaining terms are incorrect.

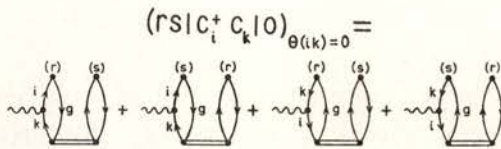


Fig. 5

The two-particle-two-hole structure of the RPA ground state enables the direct excitation of two-phonon states. This effect is represented in fig. 5 and is accounted for by eq. (4.5) of ref. 1 which we quote now

$$(rs | c_i^+ c_k | 0) = \sum_g (\Psi_{kg}^{(r)} \Psi_{gi}^{(s)} + \Psi_{kg}^{(s)} \Psi_{gi}^{(r)}) \quad \begin{matrix} \theta(gi) \\ \text{(if } \theta(ik) = 0) \end{matrix} \quad (2.25)$$

A derivation of the same equation in line with our present approach, has been given in ref. 2. Contributions to $(rs | c_i^+ c_k | 0)$ when $\theta(ik) \neq 0$ arise from the admixture of one-phonon states into two-phonon states. This effect contributes a term of the form

$$\Delta (rs | D | 0) = \sum_t \frac{(rs | H | t) (t | D | 0)}{E_r + E_s - E_t} \quad (2.26)$$

to the transition amplitude $(rs | D | 0)$. The final result may be written as follows

$$\begin{aligned} \Delta(rs | c_i^+ c_k | 0) &\simeq \\ &\simeq \sum_g (\Psi_i^{(r)} \mathcal{S}_{gk}^{(s)} + \Psi_{ig}^{(s)} \mathcal{S}_{gk}^{(r)} - \mathcal{S}_{ig}^{(r)} \Psi_{gk}^{(s)} - \mathcal{S}_{ig}^{(s)} \Psi_{gk}^{(r)}) \\ &\quad (\text{if } \theta(i k) = 0) \end{aligned} \quad (2.27)$$

This equation has been derived in ref. 1. In ref. 2 a derivation, based on diagrams similar to those of fig. 6, has been given for a slightly different version of the same equation.

$$(rs | c_i^+ c_k | 0)_{\theta(i k) \neq 0} =$$

Fig. 6

3 — THE TREATMENT OF SPURIOUS STATES IN EXPRESSIONS OF FIRST ORDER IN THE GROUND STATE CORRELATIONS

Corrections to RPA transition amplitudes which take into account eq. (2.10) but neglect eqs. (2.20) and (2.24) were calculated in ref. 2. In the calculation of correlation corrections to electromagnetic transition amplitudes the terms of eq. (2.10) containing a factor $\frac{1}{2}$ were not taken into account. However, the effect of the omission of the spurious states from the sum over s in eq. (2.11) was considered and it was found to make considerable difference to the transition amplitude. This does not seem correct since the spurious states are generated by collective operators (center of mass position and momentum, etc.), which should commute with boson operators generating intrinsic excitations. It will be shown presently that this situation should be greatly remedied by the inclusion of the terms in eq. (2.10) which contain the factor $\frac{1}{2}$, as has been done in the calculation of form factors for electron scattering. Of course, one should also consider eqs. (2.21) and (2.23).

If we consider an operator

$$D = \sum_{ij} d_{i,j} c_i^+ c_j \quad (3.1)$$

eqs. (2.8), (2.9), (2.21) and (2.23) enable us to write

$$(r | D | 0) = (r | D | 0)_{\text{RPA}} + \Delta (r | D | 0) \quad (3.2)$$

with

$$(r | D | 0)_{\text{RPA}} = \sum \Psi_{ij}^{(r)} d_{j,i} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \Delta (r | D | 0) = & -\frac{1}{2} \sum [\Psi_{\alpha m}^{(r)} \Psi_m^{(s)} \Psi_n^{(s)*} d_{n,\alpha} - \\ & - \sum_{\gamma\beta}^{(s)*} d_{\gamma,\alpha} + \Psi_{\alpha n}^{(s)*} d_{\beta,n} + \sum_{\alpha\gamma}^{(s)*} d_{\beta,\gamma}] + \\ & + \Psi_{\alpha m}^{(r)} \Psi_n^{(s)} (\Psi_n^{(s)*} d_{m,\beta} - d_{m,\rho} \sum_{np}^{(s)*} + \Psi_{\beta m}^{(s)*} d_{\beta,n} + \\ & + \sum_{pm}^{(s)*} d_{p,n}) + \Psi_{\alpha m}^{(r)} \sum_{\alpha\gamma}^{(s)*} (d_{\beta,\gamma} \Psi_m^{(s)} - d_{m,n} \Psi_n^{(s)}) + \\ & + \Psi_{\alpha m}^{(r)} \sum_{pm}^{(s)*} (d_{p,n} \Psi_n^{(s)} - d_{\beta,\alpha} \Psi_p^{(s)})] + \frac{1}{2} \sum_i (r | D | t) a^{(t)} \end{aligned} \quad (3.4)$$

where the summations extend over all repeated indices.

We will assume now that our eq. (2.1) for the RPA is based on the intrinsic part of the hamiltonian in the sense of VILLARS (5). Then the zero energy solutions (spurious states) are doubly degenerate and may be normalized to ∓ 1 . We keep the solution with positive norm. A zero energy solution is related to some collective operator $A = \sum_{ij} a_{i,j} c_i^+ c_j$ which commutes with the intrinsic part of the hamiltonian. One may write

$$\Psi_{ik}^{(\text{spurious})} = \theta(ik) a_{i,k} \quad (3.5)$$

$$\sum_{ik}^{(\text{spurious})} = \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon_k} \sum_{j,l} \hat{v}_{ij,kl} \Psi_{lj}^{(\text{spurious})} = a_{i,k} \quad (3.6)$$

These equations follow from the commutation relations of A with the intrinsic part of the hamiltonian. If D commutes with A it is seen that the spurious states nearly cancel out in the sum over s in eq. (3.4). Apparently a term of the form

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2} \sum [\Psi_{\alpha m}^{(r)*} \sum_{\alpha i}^{(s)*} (d_{m, \beta} \sum_{\beta \gamma}^{(s)} - \sum_{m n}^{(s)} d_{n, \gamma}) + \\
 & + \Psi_{\alpha m}^{(r)} \sum_{\rho m}^{(s)*} (\sum_{\rho n}^{(s)} d_{n, \alpha} - d_{p, \gamma} \sum_{i \alpha}^{(s)})]
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

is still needed in eq. (3.4) in order for the contribution of the spurious states to cancel out exactly. However, such a term would correspond to diagrams like those shown in fig. 7 and is of higher

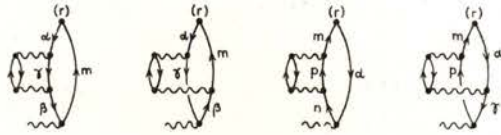


Fig. 7

order (second order perturbation theory in the phonon-phonon interaction). It is therefore reasonable to omit the spurious states in the sums over s in eq. (3.4), since it seems possible to cause the contribution of the spurious states to cancel out in that equation by introducing appropriate higher order terms which otherwise (as far as the remaining states are concerned) should be unimportant. The fact that the spurious states do not cancel out exactly in our approximation (it being necessary for that to introduce also some terms which may be considered of higher order) is due to the fact that our spurious states are not 100 % spurious. It should be possible to reformulate the theory in such a way as to treat correctly to the desired order the collective degrees of freedom. Then one would deal with truly spurious states which, as a whole, would have an exactly zero contribution. However, that kind of approach should not lead to essentially new results and does not seem convenient for practical computations. The term in expression (3.7) corresponding to a spurious s state measures our error in neglecting the spurious states. The sum over t in eq. (3.4) should be assumed to extend

only over non spurious states, since the quantity $a^{(t)}$ should be zero for spurious states. Indeed, the $a^{(t)}$ are the amplitudes of the one-phonon components we must add to the RPA ground state in order to achieve stability against admixture with one-phonon states. If H is the intrinsic hamiltonian, in VILLARS sense (5), the RPA ground state is automatically stable against admixture with spurious states so that one expects $a^{(t)}$ to be zero when $|t\rangle$ is a spurious state.

We discuss now the transition amplitude to a two-phonon state, when one of the phonons is spurious. If, for instance, the state s is a spurious state, one would expect the quantity $(rs|D|O)$ to cancel out, since D is an intrinsic operator and the state $|s\rangle$ is generated by a collective operator which commutes with D . However our spurious states are not 100 % spurious, so it is appropriate to try and find out to what extent this conjecture is realized. The matrix element $(rs|D|O)$ may be calculated with the help of eqs. (2.25) and (2.27). Keeping only the larger terms, which contain at least one large amplitude $\Psi_{\alpha m}^{(r)}$ or $\Psi_{\alpha m}^{(s)}$ we find

$$\begin{aligned} (rs|D|O) \simeq & \Sigma [\Psi_{\alpha m}^{(r)} (d_{m,n} \Psi_n^{(s)} - d_{m,\beta} \sum_{\beta\alpha}^{(s)} - \\ & - \Psi_{m\beta}^{(s)} d_{\beta,\alpha} + \sum_{m\alpha}^{(s)} d_{n,\alpha}) + \Psi_{\alpha m}^{(s)} (d_{m,n} \Psi_n^{(r)} - \\ & - d_{m,\beta} \sum_{\beta\alpha}^{(r)} - \Psi_{m\beta}^{(r)} d_{\beta,\alpha} + \sum_{m\alpha}^{(r)} d_{n,\alpha})] \end{aligned} \quad (3.8)$$

the sum being over all repeated indices. If s is a spurious state s_0 and D is an intrinsic operator (which commutes with the previously considered operator A) then eq. (3.8) becomes simply

$$(rs_0|D|O) \simeq \Sigma \Psi_{\alpha m}^{(s_0)} (d_{m,n} \Psi_n^{(r)} - d_{m,\beta} \sum_{\beta\alpha}^{(r)} - \Psi_{m\beta}^{(r)} d_{\beta,\alpha} + \sum_{m\alpha}^{(r)} d_{n,\alpha})$$

In general the state r is not strongly collective, so that the amplitudes $\Psi_n^{(r)}$ and $\sum_{ij}^{(r)}$ are small quantities and the magnitude of $(rs_0|D|O)$ is negligible in the average. If it does not come out exactly zero it is only because our spurious states are not exactly spurious. They are generated by operators A which are only approximately collective.

4 — GENERAL TREATMENT OF THE SPURIOUS STATES

We will now show, under rather general arguments, that the contribution of the spurious states actually cancels out and should be discarded from expressions of the type we have been considering. In order to tackle this problem we introduce the projection operator of the vacuum $|0\rangle$ of the boson operators B_μ . From the commutation relations

$$\begin{aligned} [B_\mu, B_\nu] &= [B_\mu^+ B_\nu^+] = 0 \\ [B_\mu, B_\nu^+] &= \delta_{\mu\nu} \end{aligned} \quad (4.1)$$

It follows that the projection operator Q of the vacuum $|0\rangle$ may be written (6)

$$\begin{aligned} Q \equiv |0\rangle\langle 0| &= 1 - \sum_\mu B_\mu^+ B_\mu + \frac{1}{2!} \sum_{\mu\nu} B_\mu^+ B_\nu^+ B_\nu B_\mu \\ &\quad - \frac{1}{3!} \sum_{\mu\nu\sigma} B_\mu^+ B_\nu^+ B_\sigma^+ B_\sigma B_\nu B_\mu + \dots \end{aligned} \quad (4.2)$$

one readily verifies the results

$$Q^2 = Q \quad (4.3)$$

$$Q|0\rangle = |0\rangle \quad (4.4)$$

$$QB_\mu^+ |0\rangle = QB_\mu^+ B_\nu^+ |0\rangle = \dots = 0 \quad (4.5)$$

it is also interesting to consider the operators

$$q_\mu = 1 - B_\mu^+ B_\mu + \frac{1}{2!} B_\mu^{+2} B_\mu^2 - \frac{1}{3!} B_\mu^{+3} B_\mu^3 + \dots, \quad (4.6)$$

$$Q_{\alpha\beta\dots\gamma} = 1 - \sum_{\mu \neq \alpha\beta\dots\gamma} B_\mu^+ B_\mu + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{\mu \neq \alpha\beta\dots\gamma \\ \nu \neq \alpha\beta\dots\gamma}} B_\mu^+ B_\nu^+ B_\nu B_\mu - \dots \quad (4.7)$$

The operator q_μ projects on to the states which do not contain the phonon μ while the operator $Q_{\alpha\beta\dots\gamma}$ projects on to the vacuum or the states which contain only phonons $\alpha\beta\dots\gamma$.

Obviously

$$Q = \prod_{\mu} q_{\mu} \quad (4.8)$$

$$Q_{\alpha\beta\dots\gamma} = \prod_{\mu \neq \alpha\beta\dots\gamma} q_{\mu} \quad (4.9)$$

In order to calculate the expectation value of an operator A in the boson vacuum $|0\rangle$ we consider the identity

$$\langle 0 | A | 0 \rangle = \frac{\langle \Phi_0 | Q A Q | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | Q | \Phi_0 \rangle}, \quad (4.10)$$

which, on account of eq. (4.2), leads immediately to an expansion for $\langle 0 | A | 0 \rangle$ in sums over boson states μ (the first term in that expansion is $\langle \Phi_0 | A | \Phi_0 \rangle$, the next term is given as a single sum over μ etc.).

The operator A may be, for instance, the commutator $[B_\mu, M]$, where M is a transition operator, or A may be the mean square radius operator, etc. From symmetry considerations we may know, *a priori*, that A commutes with some boson operators, say, those corresponding to the indices $\alpha\beta\dots\gamma$. For instance, if A is the intrinsic part of the hamiltonian, or of any other operator, as discussed by Villars (5) it commutes with the momentum and center of mass operators. (Then the operators $B_\alpha, \dots, B_\gamma, B_\alpha^+, \dots, B_\gamma^+$, would be some linear combinations of the momentum and center of mass operators, assuming a spherical system). We want to show that under such circumstances we may write

$$\langle 0 | A | 0 \rangle = \frac{\langle \Phi_0 | Q_{\alpha\beta\dots\gamma} A Q_{\alpha\beta\dots\gamma} | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | Q_{\alpha\beta\dots\gamma} | \Phi_0 \rangle} \quad (4.11)$$

thus effectively dropping out, from the sums over intermediate states, the terms containing the labels $\alpha \beta \dots \gamma$ (the spurious states). This result becomes obvious if we remark that

$$Q_{\alpha \beta \dots \gamma} = \sum_{n_{\alpha} n_{\beta} \dots n_{\gamma}} |n_{\alpha} n_{\beta} \dots n_{\gamma}\rangle \left\{ \frac{1}{n_{\alpha}! n_{\beta}! \dots n_{\gamma}!} \right\} |n_{\alpha} n_{\beta} \dots n_{\gamma}\rangle \quad (4.12)$$

where $n_{\alpha} \dots n_{\gamma}$ designate the numbers of the phonons $\alpha \dots \gamma$. One also has

$$\begin{aligned} & \langle n_{\alpha} n_{\beta} \dots n_{\gamma} | A | n'_{\alpha} n'_{\beta} \dots n'_{\gamma} \rangle \\ & = \langle 0 | A | 0 \rangle \langle n_{\alpha}! n_{\beta}! \dots n_{\gamma}! | \delta n_{\alpha} n'_{\alpha} \delta n_{\beta} n'_{\beta} \dots \delta n_{\gamma} n'_{\gamma} \rangle \end{aligned} \quad (4.13)$$

Therefore we see that

$$\begin{aligned} & \langle \Phi_0 | Q_{\alpha \beta \dots \gamma} A Q_{\alpha \beta \dots \gamma} | \Phi_0 \rangle \\ & = \langle 0 | A | 0 \rangle \sum_{n_{\alpha} n_{\beta} \dots n_{\gamma}} \langle \Phi_0 | (|n_{\alpha} n_{\beta} \dots n_{\gamma}\rangle \left\{ \frac{1}{n_{\alpha}! n_{\beta}! \dots n_{\gamma}!} \right\} |n_{\alpha} n_{\beta} \dots n_{\gamma}\rangle) | \Phi_0 \rangle \\ & = \langle 0 | A | 0 \rangle \langle \Phi_0 | Q_{\alpha \beta \dots \gamma} | \Phi_0 \rangle \end{aligned}$$

which proves eq. (5.10).

ACKNOWLEDGEMENTS

One of us (J. P.) would like to thank Professor J. R. DE ALMEIDA SANTOS for his encouragement and the Comissão de Estudos de Energia Nuclear, Instituto de Alta Cultura, for a grant.

REFERENCES

- (1) PROVIDÊNCIA, J. da — *Nuclear Physics*, **83**, 299 (1966).
- (2) PROVIDÊNCIA, J. da, & SHAKIN, C. M. — *Nuclear Physics A* 108, 609 (1968).
- (3) PROVIDÊNCIA, J. da — *Nuclear Physics*, A 108, 589 (1968).
- (4) FUKUDA, N., IWAMOTO, F., & SAWADA, K. — *Phys. Rev.*, **135**, A 392 (1964).
- (5) VILLARS, F. — *Nuclear Physics*, **74**, 353 (1965).
- (6) SHWINGER, J. — *Unpublished*.

Toute la correspondance concernant la rédaction de PORTUGALIAE PHYSICA doit être adressée à

PORTUGALIAE PHYSICA
Laboratório de Física da Faculdade de Ciências
LISBOA - 2 (Portugal)

Prix de l'abonnement:	250 escudos (US \$8.50) par volume
Prix des volumes déjà parus:	300 escudos (US \$10)
Prix du fascicule:	75 escudos (US \$2.50)

Les membres de la «Sociedade Portuguesa de Química e Física» ont une réduction de 50 % sur les prix indiqués.

Les Universités, les Laboratoires de Physique, les Académies, les Sociétés Scientifiques et les Revues de Physique sont invités à recevoir cette revue en échange de leurs publications.

PORTUGALIAE PHYSICA donnera un compte-rendu détaillé de tous les ouvrages soumis à la rédaction en deux exemplaires.

All mail concerning PORTUGALIAE PHYSICA to be addressed to:

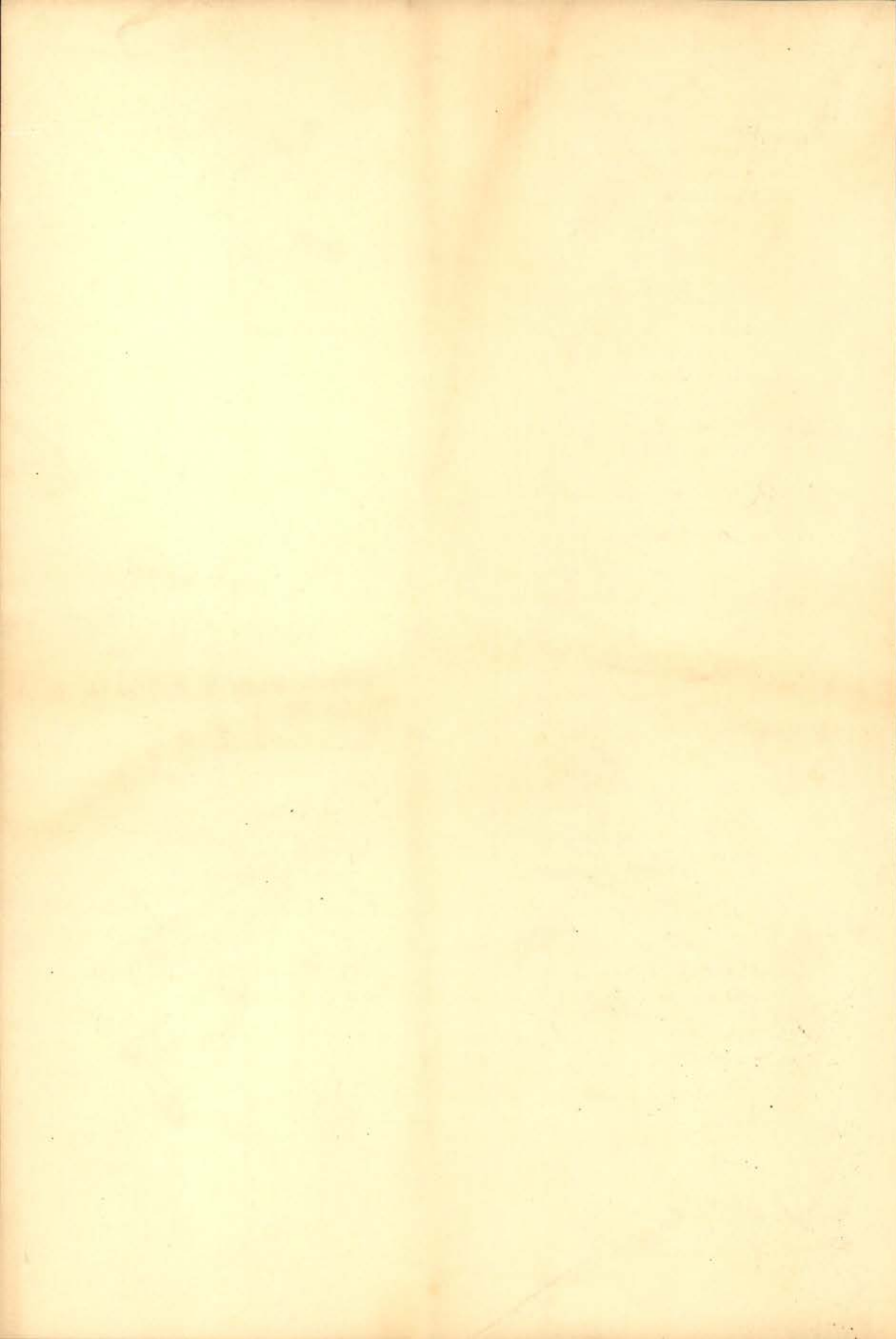
PORTUGALIAE PHYSICA
Laboratório de Física da Faculdade de Ciências
LISBOA - 2 (Portugal)

Subscription rates:	250 escudos (US \$8.50) per volume
Price of past volumes:	300 escudos (US \$10)
Price of copy:	75 escudos (US \$2.50)

Members of the «Sociedade Portuguesa de Química e Física» may obtain *Portugaliae Physica* at a reduced price (50 %).

Universities, Physics Laboratories, Academies, Scientific Societies and Physics Publications are invited to receive this review in exchange for their publications.

PORTUGALIAE PHYSICA will give a detailed report of any book if two copies have been submitted.



PORTUGALIAE PHYSICA

VOLUME 5

FASCÍCULO 3

1 9 6 8

INSTITUTO DE ALTA CULTURA

CENTROS DE ESTUDOS DE FÍSICA DAS UNIVERSIDADES PORTUGUESAS

PORTUGALIAE PHYSICA

Fundadores: A. Cyrillo Soares, M. Telles Antunes, A. Marques da Silva,
M. Valadares.

VOLUME 5

1968

FASCICULO 3

VOLUMES PUBLICADOS:

Vol. 1 — 1943-45 — 326 pp.

Vol. 2 — 1946-47 — 256 pp.

Vol. 3 — 1949-54 — 173 pp.

Vol. 4 — 1965-66 — 304 pp.

Redacção: Laboratório de Física da Faculdade de Ciências — Lisboa-2
(PORTUGAL)

Comissão de redacção:

J. Moreira de Araújo — Carlos Braga
— Carlos Cacho — A. Pires de Car-
valho — M. Abreu Faro — J. Gomes
Ferreira — António Gião — F. Bra-
gança Gil — Manuel Laranjeira.

Amaro Monteiro — J. Pinto Peixoto
— J. da Providência — Lídia Sal-
gueiro — J. de Almeida Santos — José
Sarmiento — António da Silveira —
J. Veiga Simão.

Í N D I C E

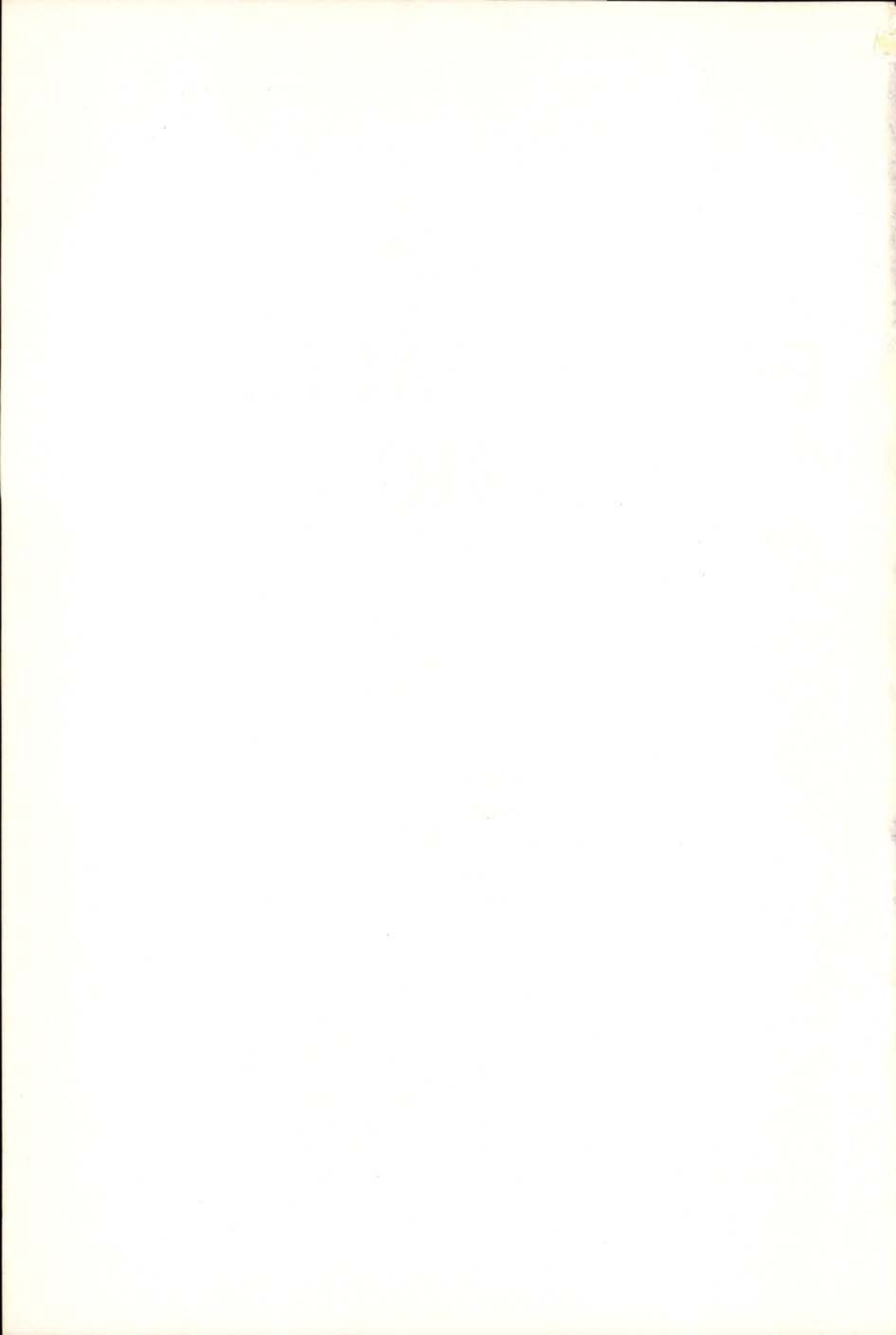
(Table des matières)

<i>Convergence and concentration dependence of isotopic thermal diffusion factor,</i> by M. F. LARANJEIRA, M. ÁUREA CUNHA and M. E. FRONTEIRA E SILVA	49
<i>Concentration dependence of the isotopic thermal diffusion factor for mixtures</i> $^3\text{He} - ^4\text{He}$ and $\text{H}_2 - \text{D}_2$, by M. F. LARANJEIRA, M. ÁUREA CUNHA and M. E. FRONTEIRA E SILVA	61
<i>Approximate methods in nuclear structure calculations,</i> by J. DA PROVIDÊNCIA	71
<i>Mécanismes de transfert à un nucléon,</i> par R. DA SILVEIRA	93
<i>Note on correlation energy of the electron gas,</i> by LÍDIA FERREIRA	119

CDU 53 (469) (05)

PORTUGALIAE PHYSICA

VOLUME 5
FASCÍCULO 3
1 9 6 8



CONVERGENCE AND CONCENTRATION DEPENDENCE OF ISOTOPIC THERMAL DIFFUSION FACTOR

M. F. LARANJEIRA, M. ÁUREA CUNHA

and

M. E. FRONTEIRA E SILVA

Laboratório Calouste Gulbenkian de Espectrometria de Massa e Física Molecular
COMISSÃO DE ESTUDOS DE ENERGIA NUCLEAR — I. A. C. — Instituto Superior Técnico — Lisboa

SUMMARY — The convergence and the concentration dependence of the isotopic thermal diffusion factor is theoretically studied, on the basis of Lennard-Jones and exponential-six models.

The concentration dependence is not negligible *a priori* for binary mixtures of light isotopes, and significant differences may be expected for α_T if one or other of the isotopes is present in tracer concentrations.

In the majority of practical cases, the Kihara-Mason scheme of approximation provides better convergence and is therefore preferred.

1 — INTRODUCTION

According to the theory of CHAPMAN and ENSKOG for non-uniform gases (1, 2), the expressions for transport coefficients are obtained from solutions to infinite set of simultaneous equations.

Two alternative schemes of series solutions have been proposed, one by CHAPMAN & COWLING (1) and the other by KIHARA (3) which has been extended by MASON (4).

The convergence of the series, in both schemes, is dependent on the particular form of the intermolecular potential assumed, but it is known to be fast for viscosity, thermal conductivity and concentration diffusion.

For thermal diffusion the convergence is comparatively slower and the differences between the values corresponding to the same order

of approximation in both schemes may be quite significant. The potential form, the temperature, the mass and the concentration of the molecules are of much more influence on the convergence than in the other transport phenomena.

Furthermore, the complexity of the mathematical expressions for thermal diffusion increases tremendously for higher order of approximations, which makes theoretical studies very involvent and only possible by numerical means.

For those reasons, the convergence is mostly studied by considering mixtures having extreme cases of mass and/or concentration ratios, like Lorentzian, Masonian and isotopic mixtures (5), which may bracket most real mixtures.

For real binary mixtures with «normal» behaviour in the sense that the thermal diffusion factor, a_T , does not change sign with concentration, one may take the advantage of the discovery of one of us (6, 7, 8) that the inverse of a_T is approximately linear with concentrations (9, 10). The importance of this result is that it can reduce the magnitude of the convergence problem to the limiting cases corresponding to the mole fractions of the components equal to unity (5).

In this paper we consider the convergence of the theoretical approximations to the isotopic thermal diffusion factor as given by Chapman-Cowling and Kihara-Mason schemes, on the basis of Lennard-Jones and exponential-six models which are of common use to fit experimental data.

Concentration dependence which is certainly significant for mixtures of light isotopes is also discussed.

2 — THEORETICAL FORMULAS

For a binary mixture of isotopes, the thermal diffusion factor can be written in the following form:

$$a_T = a_0 M_{12} [1 + \gamma (x_1 - x_2) M_{12} + \dots] \quad [1]$$

$$M_{12} = \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} ; \quad x_1 + x_2 = 1$$

where m_1 , m_2 and x_1 , x_2 are, respectively, the molecular masses and the mole fractions of isotopes of kind 1 and 2.

a_0 — the so called reduced isotopic thermal diffusion factor — and γ are dimensionless quantities depending only on the temperature

and the particular model considered. For the Chapman-Cowling scheme of solution (1, 2, 5), γ is given by

$$[\gamma]^C = \frac{3(5 - A^*)}{2(5 + 2A^*)} \cdot \frac{5 - 3(5 - 4B^*)/5}{(5 + 2A^*) + 3(5 - 4B^*)/8} \quad [2]$$

and the first approximation to the reduced isotopic thermal diffusion factor, which we denote by $[\alpha_0]_1^C$, is given by

$$[\alpha_0]_1^C = \frac{15(6C^* - 5)}{16A^*} \cdot \frac{5 + 2A^*}{5 + 2A^* + (5 - 4B^*)/8} \quad [3]$$

where A^* , B^* and C^* have their usual meaning.

The Kihara-Mason expressions for γ and for the first approximation of the reduced isotopic thermal diffusion factor, $[\alpha_0]_1^K$, can be obtained from equations [2] and [3], by dropping the factors $(5 - 4B^*)$:

$$[\gamma]^K = \frac{5 - 3A^*}{2(5 + 2A^*)} \quad ; \quad [\alpha_0]_1^K = \frac{15(6C^* - 5)}{16A^*} \quad [4]$$

Expressions for the reduced isotopic thermal diffusion factor in both schemes have been calculated as far as the second approximation only (4) which are expected to be accurate within 1% (11).

Since they are very complex, we do not give them here.

Equation [1] to the isotopic thermal diffusion factor, α_T , is a series development of a general expression, and is valid when molecular masses m_1 and m_2 are close enough, and the potential parameters are assumed to be equal for both isotopes.

With such hypotheses, convergence studies of α_T have to consider, at least in principle, the convergence of successive approximations for α_0 according to Chapman-Cowling and Kihara-Mason schemes and, on the other hand, the influence of the series development in equation [1] which involves γ and the concentration dependence.

Both cases will be considered separately in this paper.

3 — REMARKS ON CONCENTRATION DEPENDENCE

The concentration-dependent term involving γ in equation [1] has always been neglected in experiments, even in the case of light isotopic mixtures like $^3\text{He} - ^4\text{He}$ (12, 13, 14, 15).

However, the increasing accuracy of the experimental determinations of α_T justifies some considerations on the magnitude of that term.

In the extreme case of the rigid elastic sphere model, the Chapman and Kihara values of γ are obtained from equations [2] and [4], respectively, by making into them $A^* = B^* = 1$. We have then

$$[\gamma]^C (r. e. s.) = 538 / 2065 = 0.2605$$

$$[\gamma]^K (r. e. s.) = 1 / 7 = 0.1429$$

For more realistic models the values of $[\gamma]^K$ and $[\gamma]^C$ are somewhat smaller and not so markedly different, having a small temperature dependence. They can be correlated by the equation

$$[\gamma]^C = [\gamma]^K + (5 - 4B^*) \cdot \frac{3/5 + 15/8(5 + 2A^*)}{5 + 2A^* + 3(5 - 4B^*)/8}$$

where the coefficient of $(5 - 4B^*)$ is of the order of $1/8$ to $1/9$.

For lower reduced temperatures, let us say for $T^* < 1$ in the cases of the Lennard-Jones and the exponential-six models, B^* may be somewhat bigger than $5/4$. Therefore $[\gamma]^C$ is somewhat smaller than $[\gamma]^K$.

In the majority of the practical cases, $5 - 4B^*$ is in between zero and unity. Therefore, $[\gamma]^C > [\gamma]^K$, and the Chapman-Cowling scheme of approximation will predict a somewhat larger concentration dependence for α_T .

Bearing in mind the above considerations, it follows that the concentration-dependent term may not be negligible, *a priori*, in the equation [1] for the isotopic thermal diffusion factor, and the ratio $[\alpha_T]_{x_1=1} / [\alpha_T]_{x_2=1}$ may be significant in the case of accurate experimental determinations, if the mass coefficient M_{12} is not sufficiently small.

Equation [1] predicts a linear dependence of the isotopic thermal diffusion factor with concentrations. This should be regarded as an approximation which is not in practical contradiction with the more general linear dependence of $1/\alpha_T$, once assumed that the quantity γM_{12} is small in comparison with unity.

4 — CONVERGENCE OF THE REDUCED ISOTOPIC THERMAL DIFFUSION FACTOR

Due to increasing computation facilities, a number of numerical tables have been prepared in recent years for several intermolecular potential models.

The present situation for the Lennard-Jones and the exponential-six models, which are in common use for interpretation of thermal diffusion, is presented in table 1, with the references of the tabulated

TABLE I

References for tabulations of α_0 approximations

Approx. Models	Kihara - Mason		Chapman - Cowling	
	$[\alpha_0]_1^K$	$[\alpha_0]_2^K$	$[\alpha_0]_1^C$	$[\alpha_0]_2^C$
Lennard-Jones:				
9-6	This work	16	This work	.
12-6	This work	19, 20	21	.
28-7	This work	16	This work	.
Exp. - six:				
$\alpha = 12$	17, 18	21	17, 18	19
$\alpha = 13$	This work	21	This work	19
$\alpha = 14$	This work	21	This work	19
$\alpha = 15$	17, 18	21	17, 18	19
$\alpha = 16$	19	.	.	.
$\alpha = 17$	19	.	.	.

values for the different approximations of α_0 . The general potential equations for those models are, respectively,

$$\varphi(r) = \frac{m \varepsilon}{m - n} (m/n)^{n/(m-n)} [(\sigma/r)^m - (\sigma/r)^n]$$

$$\varphi(r) = \frac{\varepsilon}{1 - 6/\alpha} \left\{ \frac{6}{\alpha} \exp [\alpha(1 - r/r_m)] - (r_m/r)^6 \right\}$$

where the letters have their usual meaning.

For the Lennard-Jones model we consider the cases where the pair of parameters (m, n) is equal to (12,6), which is the most frequently used, and also the pairs (9,6) and (28,7) recently studied (16).

For the exponential-six model we consider the usual range of the parameter α , from 12 to 17.

To study the convergence of α_0 , we have computed several first approximations which are presented in tables II and III.

TABLE II
Reduced isotopic thermal diffusion factor for Lennard-Jones models

Reduced Temp. T^*	9-6		12-6	28-7	
	$[\alpha_0]_1^K$	$[\alpha_0]_1^C$	$[\alpha_0]_1^K$	$[\alpha_0]_1^K$	$[\alpha_0]_1^C$
0.10	0.261	0.259	...	0.384	0.377
0.15	0.209	0.209	...	0.386	0.379
0.20	0.131	0.132	...	0.335	0.378
0.30	- 0.024	- 0.024	0.075	0.366	0.360
0.40	- 0.123	- 0.125	0.002	0.336	0.332
0.50	- 0.169	- 0.171	- 0.042	0.310	0.307
0.60	- 0.179	- 0.180	- 0.056	0.296	0.293
0.70	- 0.178	- 0.179	- 0.051	0.291	0.287
0.80	- 0.158	- 0.157	- 0.035	0.295	0.290
0.90	- 0.125	- 0.124	- 0.009	0.304	0.299
1.00	- 0.090	- 0.089	0.017	0.318	0.312
1.50	0.058	0.057	0.154	0.402	0.390
2.0	0.185	0.181	0.262	0.480	0.464
3.0	0.326	0.317	0.398	0.577	0.555
4.0	0.395	0.384	0.466	0.633	0.608
5.0	0.437	0.424	0.503	0.665	0.638
6.0	0.462	0.449	0.531	0.685	0.658
7.0	0.477	0.464	0.543	0.698	0.670
8.0	0.487	0.473	0.555	0.708	0.680
9.0	0.494	0.480	0.558	0.716	0.687
10.0	0.498	0.484	0.566	0.722	0.692
15.0	0.508	0.493	...	0.737	0.707
20.0	0.509	0.495	0.574	0.743	0.712
30.0	0.507	0.493	0.575	0.748	0.717
40.0	0.503	0.489	0.574	0.749	0.718
50.0	0.500	0.487	0.572	0.750	0.720
60.0	0.497	0.484	0.571	0.751	0.720
70.0	0.495	0.482	0.570	0.751	0.720
80.0	0.493	0.480	0.570	0.752	0.721
90.0	0.491	0.478	0.569	0.751	0.721
100.0	0.490	0.477	0.568	0.752	0.721

TABLE III

Reduced isotopic thermal diffusion factor for exp. -6 models

Reduced Temp. T^*	$\alpha = 13$		$\alpha = 14$	
	$[\alpha_0]_1^K$	$[\alpha_0]_1^C$	$[\alpha_0]_1^K$	$[\alpha_0]_1^C$
0.1	0.283	0.280	0.285	0.282
0.2	0.218	0.218	0.233	0.232
0.3	0.104	0.105	0.130	0.131
0.4	0.014	0.014	0.045	0.046
0.5	- 0.039	- 0.039	- 0.004	- 0.004
0.6	- 0.061	- 0.062	- 0.025	- 0.026
0.7	- 0.063	- 0.063	- 0.027	- 0.027
0.8	- 0.052	- 0.051	- 0.016	- 0.016
0.9	- 0.033	- 0.032	0.002	0.002
1.0	- 0.009	- 0.010	0.025	0.025
1.2	0.043	0.043	0.076	0.074
1.4	0.095	0.094	0.127	0.124
1.6	0.143	0.140	0.174	0.170
1.8	0.186	0.182	0.215	0.210
2.0	0.223	0.218	0.251	0.244
2.5	0.295	0.287	0.321	0.313
3.0	0.346	0.336	0.371	0.361
3.5	0.382	0.372	0.407	0.395
4.0	0.408	0.397	0.433	0.420
5.0	0.442	0.430	0.465	0.452
6.0	0.461	0.448	0.487	0.473
7.0	0.472	0.459	0.498	0.484
8.0	0.478	0.466	0.506	0.491
9.0	0.481	0.468	0.509	0.495
10.0	0.482	0.470	0.511	0.497
12.0	0.482	0.470	0.513	0.499
14.0	0.481	0.469	0.512	0.498
16.0	0.478	0.466	0.510	0.496
18.0	0.476	0.464	0.508	0.494
20.0	0.472	0.460	0.507	0.494
25.0	0.465	0.454	0.503	0.489
30.0	0.461	0.450	0.499	0.486
35.0	0.457	0.446	0.496	0.483
40.0	0.455	0.444	0.495	0.482
45.0	0.454	0.442	0.494	0.480
50.0	0.452	0.440	0.493	0.480
60.0	0.450	0.438	0.493	0.479
70.0	0.446	0.434	0.495	0.481
80.0	0.448	0.437	0.497	0.483
90.0	0.448	0.437	0.499	0.485
100.0	0.449	0.438	0.500	0.486
200.0	0.460	0.447	0.518	0.502

As table 1 shows, the second Kihara-Mason approximation to the reduced thermal diffusion factor, $[\alpha_0]_2^K$, has been tabulated for the majority of the models. For that reason, it will be regarded as a reference in our global considerations about convergence which will be studied by means of the ratio

$$\alpha_0 / [\alpha_0]_2^K$$

where α_0 denotes, in general, the first Kihara approximation, $[\alpha_0]_1^K$, and the first and second Chapman approximations, $[\alpha_0]_1^C$ and $[\alpha_0]_2^C$, respectively.

The three ratios defined in the above way show a similar behaviour with the reduced temperature, T^* , for all the special cases studied, what simplifies appreciably the discussion on the convergence of α_0 .

In fig. 1 we present the typical cases for Lennard-Jones (12,6) and exponential-six ($\alpha = 14$) models.

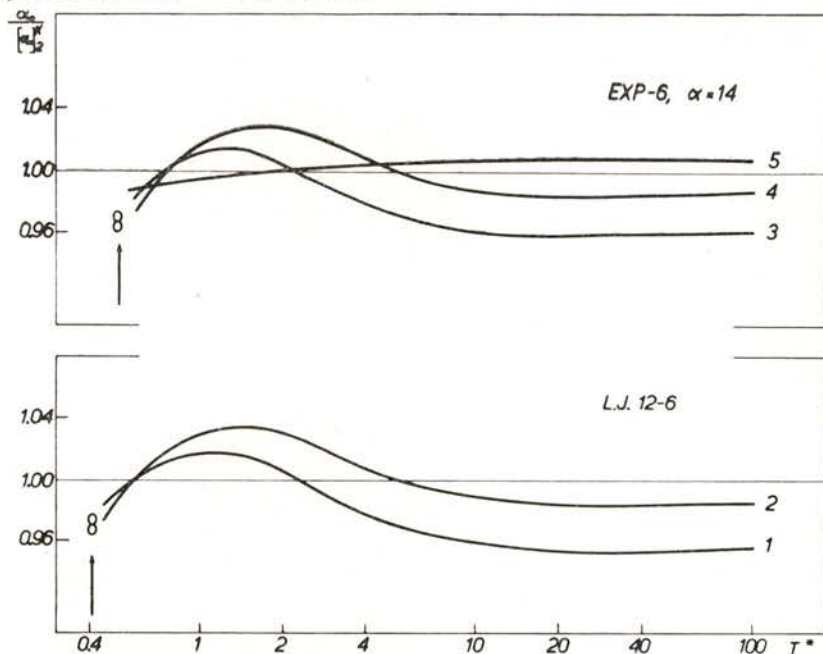


Fig. 1 — Ratios $\alpha_0 / [\alpha_0]_2^K$ against reduced temperature, for Lennard-Jones (12, 6) and exponential-six ($\alpha = 14$) models.

- Curves 1 and 3 — σ_0 equals to $[\sigma_0]_1^C$ (CHAPMAN)
- Curves 2 and 4 — σ_0 equals to $[\sigma_0]_1^K$ (KIHARA)
- Curve 5 — σ_0 equals to $[\sigma_0]_2^C$ (CHAPMAN)

The arrow localizes the value of T^* for which $[\alpha_0]_2^K = 0$.

Unfortunately, $[\alpha_0]_2^C$ has not been tabulated for that important case of the Lennard-Jones model because several collision integrals, $\Omega^{(l,s)*}$, which are needed, have not been computed yet for higher values of (l, s) . However, it may be expected that the general trend of $[\alpha_0]_2^C/[\alpha_0]_2^K$ may be similar to the corresponding ratios for the exponential-six models, i. e., a trend similar to the curve 5 in fig. 1.

By taking fig. 1 as representative of a general behaviour, we may conclude the following:

a) Kihara and Chapman second approximations agree within about $\pm 1\%$ (see curve 5).

b) For higher reduced temperatures, say for $T^* > 3$, the Kihara-Mason scheme provides faster convergence, and the difference between $[\alpha_0]_2^K$ and $[\alpha_0]_1^K$ is of the order of 2% (see curves 2 and 4).

c) The situation is reserved for lower reduced temperatures, where the Chapman-Cowling scheme of approximations provides better convergence.

d) Except at lower temperatures, $[\alpha_0]_1^K > [\alpha_0]_1^C$. This conclusion is also inferred by comparison of equations [3] and [4], since usually $(5 - 4B^*) > 0$.

The above discussion is limited to the temperature range $100 > T^* > 0.4$ which covers the most common practical cases. For lower temperatures α_0 reverses sign for some potential models. Therefore the ratio $\alpha_0/[\alpha_0]_2^K$ is not adequate to study the convergence.

On the other hand, the conclusions may be extrapolated for $T^* > 100$ since that ratio and the thermal diffusion factor as well remain almost constant.

5 — CONCLUSIONS

As we have done in this paper, theoretical study of the isotopic thermal diffusion factor seems to be conveniently divided into two aspects: a) one concerning the convergence of the reduced factor, α_0 ; b) the other referring to the concentration-dependent term involving the quantity γ in equation [1].

On the basis of the Lennard-Jones and the exponential-six intermolecular potentials which are in common use to fit experimental data, the Kihara-Mason scheme of approximations provides faster convergence for α_0 , at higher reduced temperatures, say for $T^* > 3$.

Other remarkable feature of this scheme is that theoretical formulas are simpler and involving a smaller number of collision integrals, therefore reducing appreciably a number of complex numerical computations.

Regarding the concentration dependence, it is certainly advisable to take it into account in accurate determinations of the thermal diffusion factor for mixtures of light isotopes, specially if one of them is present in tracer concentrations only.

In the majority of practical cases, say for $T^* > 1$, the Chapman-Cowling scheme gives rise to somewhat higher concentration dependence, since $[\gamma]^C > [\gamma]^K$ in equation [1].

Of course, we may not say, on theoretical bases only, that such dependence will be in better accordance with experiments, but we might expect it since this is the usual behaviour for non-isotopic mixtures. However, this aspect may hardly be detected in practice, for isotopic mixtures.

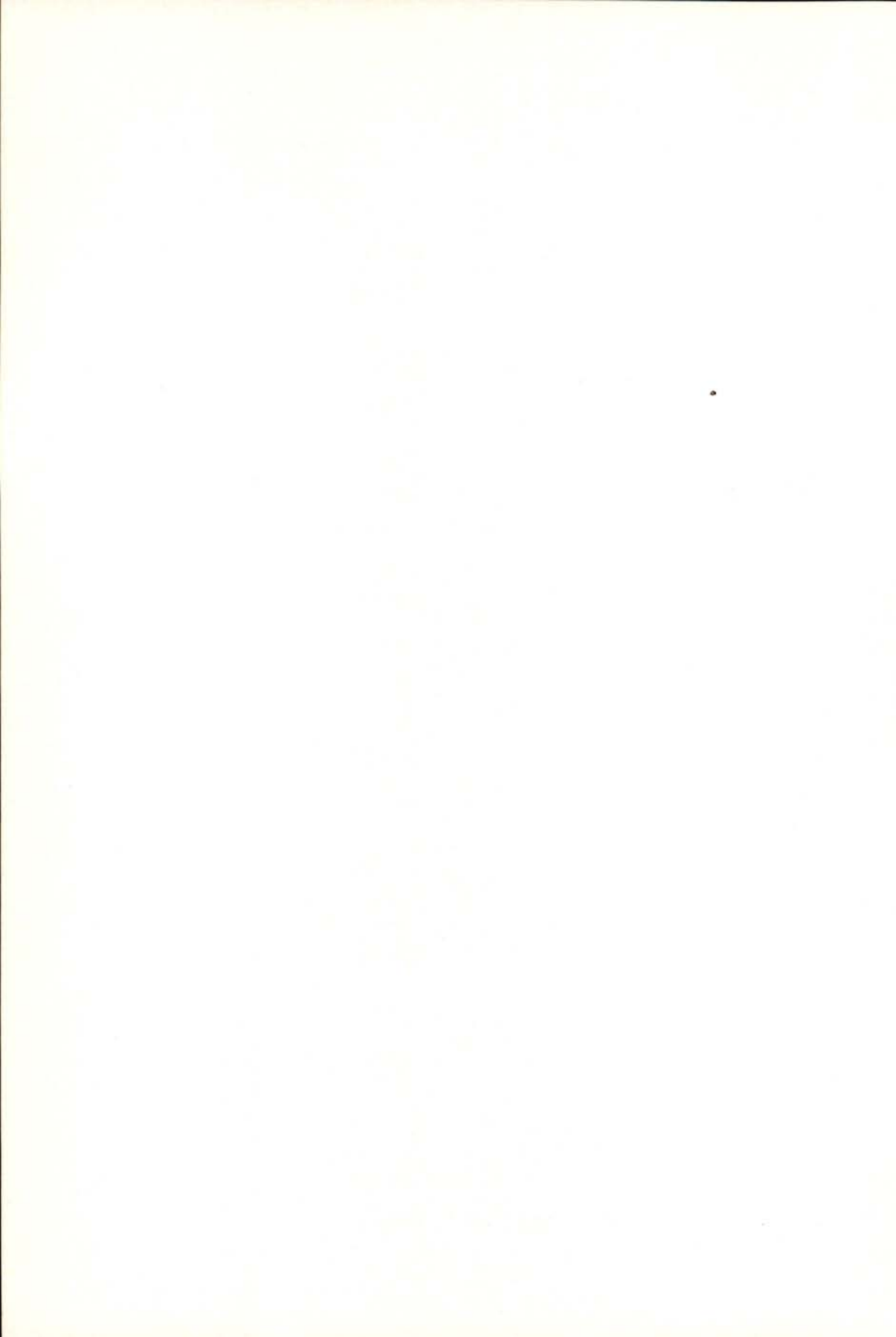
As an over-all conclusion, we may say that each scheme of approximation has its own theoretical advantages and limitations, but in the majority of practical cases of isotopic thermal diffusion the Kihara-Mason scheme is preferred.

Recently, PAUL, HOWARD & WATSON (10) carried out accurate experiments with ^3He — ^4He mixtures which provide a significant example for comparison with the theory. This will be done in a following paper.

BIBLIOGRAPHY

- (1) CHAPMAN, S., & COWLING, T. G. — *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge University Press (1953).
- (2) HIRSCHFELDER, J. O., CURTISS, C. F., & BIRD, R. B. — *Molecular Theory of Gases and Liquids*. John Wiley & Sons, New York (1954).
- (3) KIHARA, T. — *Rev. Mod. Phys.*, **25**, 831 (1953).
- (4) MASON, E. A. — *J. Chem. Phys.*, **27**, 75 (1957).
- (5) MASON, E. A., MUNN, R. J., & SMITH, F. J. — *Advances in Atomic and Molecular Physics*, vol. 2. Academic Press, New York (1966).
- (6) LARANJEIRA, M. F. — *Physica*, **26**, 409 (1960).
- (7) LARANJEIRA, M. F. — *Physica*, **26**, 417 (1960).
- (8) LARANJEIRA, M. F., & KISTEMAKER, J. — *Physica*, **26**, 431 (1960).
- (9) MASON, E. A., WEISSMAN, S., & WENDT, R. P. — *Phys. Fluids*, **7**, 174 (1964).
- (10) PAUL, R., HOWARD, A. J., & WATSON, W. W. — *J. Chem. Phys.*, **43**, 1622 (1965).
- (11) MASON, E. A. — *J. Chem. Phys.*, **27**, 782 (1957).
- (12) MORAN, T. I., & WATSON, W. W. — *Phys. Rev.*, **109**, 1184 (1958).

- (13) Van der VALK, F., & de VRIES, A. E. — *J. Chem. Phys.*, **34**, 345 (1961).
- (14) SAXENA, S. C., KELLY, J. G., & WATSON, W. W. — *Phys. Fluids*, **4**, 1216 (1961).
- (15) WATSON, W. W., HOWARD, A. J., MILLER, M. E., & SHIFFRIN, R. M. — *Z. Naturforsch.*, **18a**, 242 (1963).
- (16) SMITH, F. J., MASON, E. A., & MUNN, R. J. — *J. Chem. Phys.*, **42**, 1334 (1965).
- (17) MASON, E. A. — *J. Chem. Phys.*, **22**, 169 (1954).
- (18) LARANJEIRA, M. F., MOUTINHO, A., & VASCONCELOS, M. H. — *Portgal. Phys.*, **4**, 115 (1965).
- (19) MASON, E. A., & RICE, W. E. — *J. Chem. Phys.*, **22**, 843 (1954).
- (20) MONCHICK, L., & MASON, E. A. — *J. Chem. Phys.*, **35**, 1676 (1961).
- (21) SAXENA, S. C., & MASON, E. A. — *J. Chem. Phys.*, **28**, 623 (1958).



CONCENTRATION DEPENDENCE OF THE ISOTOPIC THERMAL DIFFUSION FACTOR FOR MIXTURES $^3\text{He} - ^4\text{He}$ AND $\text{H}_2 - \text{D}_2$

M. F. LARANJEIRA, M. ÁUREA CUNHA

and

M. E. FRONTEIRA E SILVA

Laboratório Calouste Gulbenkian de Espectrometria de Massa e Física Molecular
COMISSÃO DE ESTUDOS DE ENERGIA NUCLEAR — I. A. C. — Instituto Superior Técnico — Lisboa

SUMMARY — Experimental data for mixtures of $^3\text{He} - ^4\text{He}$ and $\text{H}_2 - \text{D}_2$ have been interpreted by means of the isotopic approach for the thermal diffusion factor, including a concentration-dependent term.

It is shown that for $^3\text{He} - ^4\text{He}$ mixtures the approach is quite satisfactory, regarding the mass effect and the concentration dependence. For $\text{H}_2 - \text{D}_2$ mixtures the mass coefficient $(m_1 - m_2)/(m_1 + m_2)$ is already too large and general expressions for α_T might be preferred.

1 — INTRODUCTION

In a previous paper (1), we have theoretically studied, in terms of the Lennard-Jones and the exponential-six models, the convergence and the concentration dependence of the isotopic approach to the thermal diffusion factor, α_T , as given by the expression

$$\alpha_T = \alpha_0 M_{12} [1 + \gamma (x_1 - x_2) M_{12}] \quad [1]$$

$$M_{12} = \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2}; \quad x_1 + x_2 = 1$$

where

α_0 is the reduced isotopic thermal diffusion factor;

γ is a small, slowly varying function of the temperature;

m_1, m_2 and x_1, x_2 are, respectively, the molecular masses and the mole fractions of isotopes of kind 1 and 2.

According to Kihara-Mason and Chapman-Cowling schemes of approximations, γ is respectively given by

$$[\gamma]^K = \frac{5 - 3A^*}{2(5 + 2A^*)} \quad [2]$$

$$[\gamma]^C = [\gamma]^K + (5 - 4B^*) \frac{3/5 + 15/8(5 + 2A^*)}{5 + 2A^* + 3(5 - 4B^*)/8} \quad [3]$$

where the upper-scripts K and C refer to the scheme of approximation and A^* and B^* are the usual ratios of reduced collision integrals.

The Chapman-Cowling first approximation to the reduced isotopic thermal diffusion factor, which we denote by $[\alpha_0]_1^C$, is given by the expression

$$[\alpha_0]_1^C = \frac{15(6C^* - 5)}{16A^*} \cdot \frac{2A^* + 5}{2A^* + 5 + 3(5 - 4B^*)/8} \quad [4]$$

Kihara expression for the first approximation, $[\alpha_0]_1^K$, can be obtained from equation [4] by dropping the factor $(5 - 4B^*)$.

Second approximations for both schemes are too complicated and can be found in ref. (2).

In the majority of practical cases, $(5 - 4B^*) > 0$. Hence, $[\gamma]^C > [\gamma]^K$ and, therefore, the Chapman-Cowling scheme predicts somewhat higher concentration dependence for the isotopic thermal diffusion factor.

For the same reason, usually we have

$$[\alpha_0]_1^K > [\alpha_0]_1^C$$

At least for higher temperatures, say for $T^* > 3$, the convergence α_0 is faster for Kihara-Mason scheme of approximation (1).

The information on the validity of equation [1] for light isotopes is rather scarce, both theoretically and experimentally.

As far as we know, the concentration-dependent term involving the quantity γ has always been neglected in experiments, even in the case of $^3\text{He} - ^4\text{He}$ mixtures (3, 4, 5, 6), which, nevertheless, provides a good example for comparison with theory.

Indeed, the mass coefficient, $M_{12} = 1/7$, might *a priori* be regarded as sufficiently small and, on the other hand, the concentration dependence as predicted by equation [1] is experimentally significant.

In this paper, we also use the mixtures $\text{H}_2 - \text{D}_2$ for comparison with the theory, in order to have an idea about the experimental limits of application of equation [1], regarding the mass influence and the concentration dependence, which is also an approach to the more general linear dependence of $1/a_T$ with concentration (7, 8, 9, 10, 11).

2 — MIXTURES OF $^3\text{He} - ^4\text{He}$

Recently, PAUL, HOWARD & WATSON (12) carried out accurate determinations of the variation with concentration of the thermal diffusion factor for $^3\text{He} - ^4\text{He}$ mixtures.

Instead of using the isotopic approach of equation [1], those authors interpret the experimental data in terms of the general expressions for the thermal diffusion factor, considering the Chapman-Cowling first approximation, $[a_T]_1^C$, and Kihara-Mason first and second approximations, $[a_T]_1^K$ and $[a_T]_2^K$, respectively.

It was also assumed that $1/a_T$ was linear with concentrations, as proposed by one of us (7, 8, 9).

The exponential-six model was used, with intermolecular potential parameter $\alpha = 12.8$ and $\epsilon/k = 9.34^\circ \text{K}$ previously determined (6) by thermal diffusion for mixtures of $50\% \text{ } ^3\text{He} - 50\% \text{ } ^4\text{He}$.

Experimental errors of a_T were of the order of 1.5% and the mean temperature was approximately 160°K , which corresponds to a mean reduced temperature $T^* = 17.34$.

Following the authors' interpretation, our least square fit of experimental data gives

$$1/a_T(\text{exp}) = 14.7_6 x_4 + 14.0_1 x_3 \quad [5]$$

where x_3 and x_4 denote the mole fractions of ^3He and ^4He , respectively.

Therefore, the limiting values of $a_T(\text{exp})$ as $x_4 = 1$ and $x_3 = 1$ are, respectively,

$$[a_T(\text{exp})]_{x_4=1} = 0.071_4 \quad ; \quad [a_T(\text{exp})]_{x_3=1} = 0.068_2 \quad [6]$$

If we interpret now the experimental data in terms of the isotopic approach of equation [1], we have, instead, a linear dependence:

$$a_T(\text{exp}) = 0.071_2 x_4 + 0.067_6 x_3 \quad [7]$$

which also provides a good fit, as shown in fig. 1. Also, the corresponding values of $[a_T(\text{exp})]_{x_4=1}$ and $[a_T(\text{exp})]_{x_3=1}$ are practically the same as those mentioned above, eq. [6].

Therefore, both linear dependences may be accepted and are not in practical contradiction, since the concentration dependence is small.

For comparison of the experiments with theory we use:

a) The general expressions for the thermal diffusion factor, as done by PAUL, HOWARD & WATSON (12):

$$a_T = (6 C^* - 5) \cdot \frac{x_1 S_1 - x_2 S_2}{x_1^2 Q_1 + x_2^2 Q_2 + x_1 x_2 Q_{12}} \cdot (1 + x_{12}) \quad [8]$$

where the letters have their usual meaning, and x_{12} refers to higher approximations, i.e., $x_{12} = 0$ for first approximations.

b) The expressions for the isotopic approach, i.e., by applying equation [1]. In this equation we use the first and the second approximations to the reduced isotopic thermal diffusion factor, α_0 , according to Chapman-Cowling and Kihara-Mason schemes.

The concentration dependence is brought in evidence, in both procedures, by means of the ratio

$$R_{43} = [a_T]_{x_4=1} / [a_T]_{x_3=1} \quad [9]$$

which for the isotopic approach is simply

$$R_{43} = \frac{1 + \gamma M_{43}}{1 - \gamma M_{43}} \quad [10]$$

For ${}^3\text{He}$ — ${}^4\text{He}$ mixtures, $M_{43} = 1/7$ and the Kihara and Chapman values of γ , given by eq. [2] and [3], are, respectively

$$[\gamma]^K = 0.1054 \quad ; \quad [\gamma]^C = 0.1607$$

The comparison of the theory with experiments is summarized in table I and is illustrated in fig. 1 in terms of the isotopic approach. Theoretical curves have been normalized in the figure to cut the experimental one at $x_4 = 0.50$.

By means of the ratio R_{43} , equations [9] and [10], table I shows that the same kind of approximations to the thermal diffusion factor, either given by the general expression or by the isotopic approach, practically predict the same concentration dependence.

In this aspect, the Chapman-Cowling approximations are in better accordance with experiments.

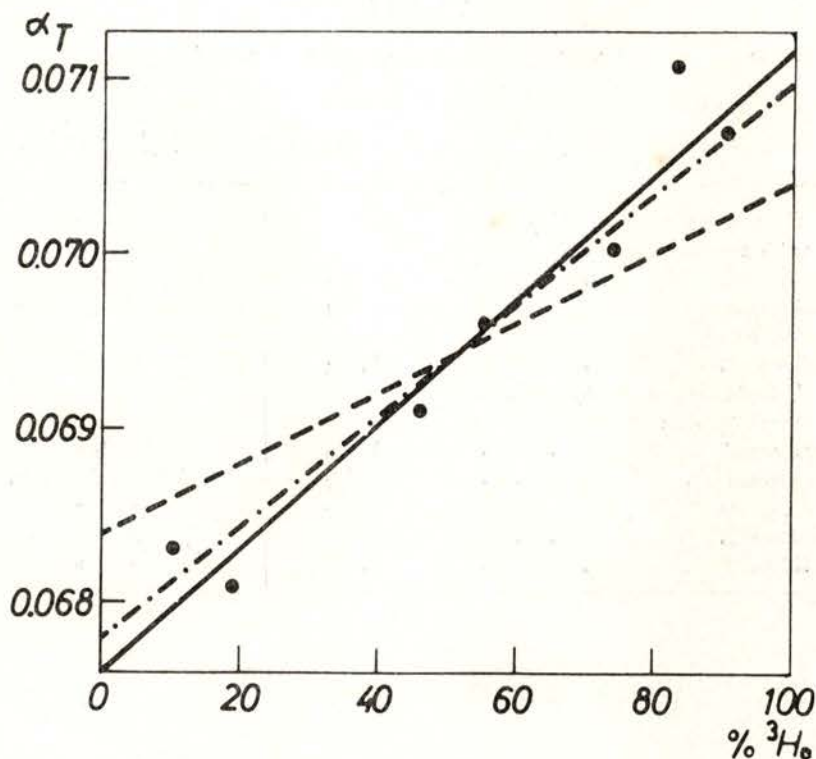


Fig. 1 — Thermal diffusion factor for $^3\text{He} - ^4\text{He}$ mixtures.

- Experimental data, ref. (12).
- Least square fit for α_T linear with concentration.
- Theoretical curve for Chapman-Cowling scheme.
- - - Theoretical curve for Kihara-Mason scheme.

Theoretical curves correspond to the isotopic approach, eq. [1], have been normalized to cut the experimental one at $x_3 = 50\%$.

On the other hand, the values of $[a_T]_{x_4=4.5}$ in the table show that the Kihara-Mason scheme of approximation is more convergent, what is the common behaviour predicted by us in ref. (1), at least for higher reduced temperatures. In this case, $T^* = 17.34$.

As an over all conclusion, we may say that the isotopic approach of equation [1] for the thermal diffusion factor is valid for $^3\text{He} - ^4\text{He}$ mixtures, and is as good as the very complicated general expressions

of equation [8], regarding the mass influence as well as the concentration dependence.

TABLE I

Comparison of the theory with experiments for $^3\text{He} - ^4\text{He}$ mixtures

Approximations for α_T	R_{34}	$[\alpha_T]_{x_4} = 0.5$
a) General expressions, $1/\alpha_T$ linear with concentration:		
Experimental	1.05 ₄	0.069 ₅
1st Chapman	1.05 ₁	7 % lower than exp.
1st Kihara	1.03 ₁	4.4 % > > >
2nd Kihara	1.03 ₄	3.8 % > > >
b) Isotopic approach, α_T linear with concentration:		
Experimental	1.05 ₃	0.069 ₄
1st Chapman	1.04 ₇	6.2 % lower than exp.
2nd Chapman	1.04 ₇	1.3 % > > >
1st Kihara	1.03 ₂	3.6 % > > >
2nd Kihara	1.03 ₂	2.1 % > > >

3 — MIXTURE OF $\text{H}_2 - \text{D}_2$

For this mixture we might expect that the isotopic approach might not be valid. Indeed, the mass coefficient, $M_{12} = 1/3$, is rather large and certainly higher powers of M_{12} would be considered in equation [1].

Also, there is some experimental evidence that the potential parameters for H_2 and D_2 are slightly different.

Nevertheless, the comparison of experimental data with theory is of interest, since it may provide some information about the limits of application of equation [1], regarding the mass influence and the concentration dependence.

We adopted the same procedure of the preceding paragraph, using the experimental data for $\text{H}_2 - \text{D}_2$ mixtures recently obtained by PAUL, HOWARD & WATSON (12), over the range from 0.080 to 0.900 in H_2 mole fraction.

The exponential-six model was applied, with $\alpha = 14.0$ and $\varepsilon'_x = 37,3^\circ \text{K}$, from ref. (13).

Experimental errors of α_T were estimated as about 1%, and the mean temperature was 160°K , i.e., $T^* = 4.29$.

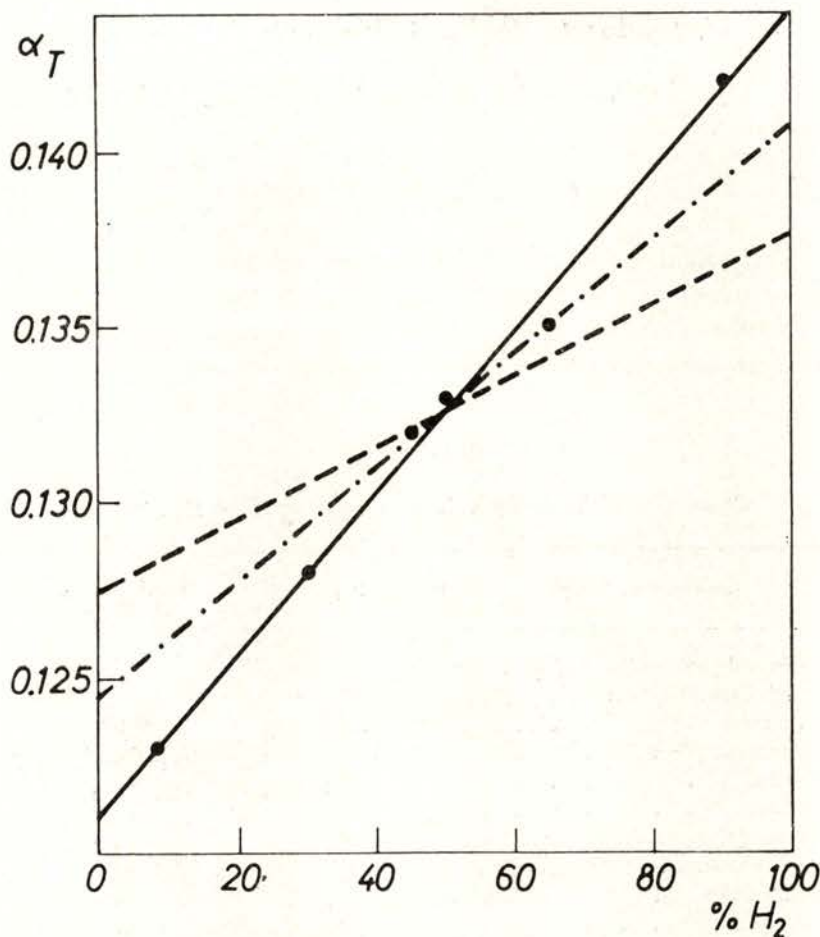


Fig. 2 — Thermal diffusion factor for $\text{H}_2 - \text{D}_2$ mixtures.

- Experimental data, ref. (12).
- Least square fit for α_T linear with concentration.
- · - Theoretical curve for Chapman-Cowling scheme.
- - - Theoretical curve for Kihara-Mason scheme.

Theoretical curves correspond to the isotopic approach, eq. [1], have been normalized to cut the experimental one at $x_2 = 50\%$.

Assuming that $1/\alpha_T(\text{exp})$ was linear with concentration, our least square fit gave

$$1/\alpha_T(\text{exp}) = 6.90_6 x_2 + 8.20_5 x_4 \quad [11]$$

where x_2 and x_4 represent, respectively, the mole fractions of H_2 and D_2 . Hence,

$$[a_T(\text{exp})]_{x_2=1} = 0.144_8 \quad ; \quad [a_T(\text{exp})]_{x_4=1} = 0.121_9$$

On the other hand, assuming a_T linear in accordance with the isotopic approach, we have

$$a_T(\text{exp}) = 0.144_0 x_2 + 0.121_9 x_3 \quad [12]$$

This equation fits as well the experimental data within the magnitude of the errors, as shown in fig. 2. In this figure we also present the theoretical curves corresponding to the isotopic approach, which have been normalized to cut the experimental one at $x_2 = 0.5$.

TABLE II

Comparison of the theory with experiments for H_2 — D_2 mixtures

Approximations for α_T	R_{42}	$[a_T]_{x_2=0.5}$
a) General expressions, $1/\alpha_T$ linear with concentration :		
Experimental	1.18 ₈	0.132 ₄
1st Chapman	1.15 ₅	4.8 % higher than exp.
1st Kihara	1.12 ₄	4.6 % » » »
2nd Kihara	1.12 ₅	2.2 % » » »
b) Isotopic approach, α_T linear with concentration :		
Experimental	1.18 ₇	0.132 ₆
1st Chapman	1.13 ₀	7.8 % higher than exp.
2nd Chapman	1.13 ₀	11 % » » »
1st Kihara	1.08 ₄	11 % » » »
2nd Kihara	1.08 ₄	10 % » » »

The values of γ for Chapman and Kihara approximations are, respectively,

$$[\gamma]^C = 0.1831 \quad ; \quad [\gamma]^K = 0.1165$$

In table II we summarize the comparison between theory and experiments, following a procedure similar to the preceding paragraph.

It can be seen that the theoretical isotopic approach of equation [1] to the thermal diffusion factor gives rise to smaller concentration dependence and higher values of α_T than those predicted by the general expression [8], the last ones being as well more in accordance with experiments.

Numerical differences are already significant, therefore we may conclude that a mass coefficient equal to $1/3$, as that of $\text{H}_2 - \text{D}_2$ mixtures, is too large for application of equation [1] to the isotopic thermal diffusion factor.

4 — CONCLUSIONS

The isotopic approach of equation [1] to the thermal diffusion factor represents the first terms of a series development of the general equation [8], when the mass coefficient, M_{12} , is assumed to be small and the potential parameters are equal for both isotopes.

The mixtures $^3\text{He} - ^4\text{He}$ and $\text{H}_2 - \text{D}_2$ provide significant examples for theoretical comparisons in the case of light isotopic mixtures and give practical information about the upper limits of M_{12} which may be accepted experimentally, in order that equation [1] be a valid approach regarding the mass influence and concentration dependence.

Of course, the major advantage of this equation over the general expression [8] is its formal simplicity, which reduces appreciably numerical computations, but it is also remarkable that it splits out in a simple way the major dependences of the thermal diffusion factor with potential models, molecular masses and concentrations of the isotopes, namely through α_0 , M_{12} and γ , which therefore may be considered separately.

BIBLIOGRAPHY

- (1) LARANJEIRA, M. F., CUNHA, M. Áurea, & FRONTEIRA E SILVA, M. E. — *Portgal. Phys.*, **5**, 3, 49 (1968).
- (2) MASON, E. A. — *J. Chem. Phys.*, **27**, 75 (1957).
- (3) MORAN, T. I., & WATSON, W. W. — *Phys. Rev.*, **109**, 1184 (1958).
- (4) van der VALK, F. & de VRIES, A. E. — *J. Chem. Phys.*, **34**, 345 (1961).
- (5) SAXENA, S. C., KELLY, J. G., & WATSON, W. W. — *Phys. Fluids*, **4**, 1216 (1961).

- (6) WATSON, W. W., HOWARD, A. J. MILLER, N. E., & SHIFFRIN, R. M. — *Z. Naturforsch.*, **18a**, 242 (1963).
- (7) LARANJEIRA, M. F. — *Physica*, **26**, 409 (1960).
- (8) LARANJEIRA, M. F. — *Physica*, **26**, 417 (1960).
- (9) LARANJEIRA, M. F., & KISTEMAKER, J. — *Physica*, **26**, 431 (1960).
- (10) MASON, E. A., WEISSMAN, S., & WENDT, R. P. — *Phys. Fluids*, **7**, 174 (1964).
- (11) MASON, E. A., MUNN, R. J., & SMITH, F. J. — *Advances in Atomic and Molecular Physics*, vol. 2. Academic Press, New York (1966).
- (12) PAUL, R., HOWARD, A. J., & WATSON, W. W. — *J. Chem. Phys.*, **43**, 1622 (1965).

APPROXIMATE METHODS IN NUCLEAR STRUCTURE CALCULATIONS

HARTREE-FOCK THEORY and RANDOM-PHASE-APPROXIMATION

J. DA PROVIDÊNCIA (*)

Laboratório de Física — Universidade de Coimbra — Portugal

ABSTRACT — An attempt has been made to describe the correlation structure of the electron gas in terms of the collective modes only.

A very simple formalism is obtained which leads to very good agreement with the results of Nozières-Pines and Hubbard for low momentum transfer ($k/k_F < 1$), if one neglects the exchange terms.

1 — INTRODUCTION

1.1 — *Variational principles*

Let H be the hamiltonian of some quantum system. The Schrödinger equation

$$H\Psi_r = \varepsilon_r \Psi_r \quad (1.1)$$

gives us the eigenfunctions Ψ_r and the eigenvalues ε_r of H . The stationary states of our system are described by the eigenfunctions Ψ_r and their energies are the eigenvalues ε_r . The time evolution of a general (possibly non-stationary) state described by a wave function Ψ is determined by the time-dependent Schrödinger equation

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (1.2)$$

(*) This work is supported by a grant provided by the Comissão de Estudos de Energia Nuclear, Instituto de Alta Cultura.

(we will use units such that $\hbar = 1$). Now, eq. (1.1) is equivalent to the variational equation

$$\delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle = 0 \quad (1.3)$$

where the wave function Ψ is varied subject to the restriction

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1. \quad (1.4)$$

Similarly, eq. (1.2) is equivalent to the variational equation

$$-i(\langle \delta \Psi | \dot{\Psi} \rangle - \langle \dot{\Psi} | \delta \Psi \rangle) + \delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle = 0. \quad (1.5)$$

It is well known that eq. (1.3) is mainly useful for providing approximations to the ground state wave function and energy. This is so because the minimum value of $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$, assuming that Ψ is normalized to unity according to eq. (1.4), is the ground state energy ε_0 , which is attained if Ψ is replaced by the ground state wave function Ψ_0 . On the other hand, eq. (1.5) may be interpreted (1) as the condition for the error in $\dot{\Psi}$ to be minimum.

1.2 — *Main concepts in the Hartree-Fock method*

In order to introduce the main concepts and mathematical methods involved in the Hartree-Fock Theory, considering not only the time-independent version but also the time-dependent extension and the more recent developments such as a discussion of the stability conditions and of the Random-Phase-Approximation (RPA), we start by considering a simple example (2).

When we don't know how to solve the Schrödinger equation for a problem it may happen that we expect the ground state wave function $\Psi_0(x)$ to be well approximated by a member of some family of normalized functions $\Phi(x; \alpha_\mu)$, where x stands for the coordinates of the system under consideration and the α_μ are real parameters. Denoting by $\alpha_\mu = \alpha_\mu^{(0)}$ the solution set (we assume, for simplicity, that there is only one solution set) of the system of equations arising from the minimum condition

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_\mu} (\Phi | H | \Phi) = 0 \quad (1.6)$$

the function which best describes the ground state is $\Phi(x; \alpha_\mu^{(0)})$. For later convenience we assume that the parametrization of the functions $\Phi(x; \alpha_\mu)$ has been made in such a way that $\alpha_\mu^{(0)} = 0$. In our approxi-

mation the ground state energy is the minimum value E_0 of the expectation values of H with respect to the functions $\Phi(x; \alpha_\mu)$,

$$E_0 = (\Phi | H | \Phi)_{\alpha_\rho = 0}. \quad (1.7)$$

1.3 — Main concepts in the Tamm-Dancoff method

We assume, for simplicity, that the functions $\Phi(x; \alpha_\mu)$ are real. Then, eq. (1.6) is equivalent to

$$\left(\frac{\partial}{\partial \alpha_\mu} \Phi | H | \Phi \right)_{\alpha_\rho = 0} = 0. \quad (1.8)$$

This equation means that at the minimum of $(\Phi | H | \Phi)$ the hamiltonian H has no matrix elements between Φ and $\partial \Phi / \partial \alpha_\mu$. Moreover, from the normalization condition

$$(\Phi | \Phi) = 1 \quad (1.9)$$

it follows that $\partial(\Phi | \Phi) / \partial \alpha_\mu = 0$, or, if Φ is real

$$\left(\frac{\partial}{\partial \alpha_\mu} \Phi | \Phi \right) = 0. \quad (1.10)$$

This means that $\partial \Phi / \partial \alpha_\mu$ is orthogonal to Φ . It is therefore tempting to try and obtain approximations to the excited states of H by diagonalizing the hamiltonian H in the subspace of the wave functions $\partial \Phi / \partial \alpha_\mu$. This leads to the eigenvalue problem

$$\sum_\nu \left[\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_\mu} | H | \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_\nu} \right)_{\alpha_\rho = 0} - E_r \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_\mu} | \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_\nu} \right)_{\alpha_\rho = 0} \right] C_\nu^{(r)} = 0 \quad (1.11)$$

(the matrix $(\partial \Phi / \partial \alpha_\mu | \partial \Phi / \partial \alpha_\nu)_{\alpha_\rho = 0}$ appears because the functions $\partial \Phi / \partial \alpha_\mu$ are in general not orthogonalized). This is the conceptual content of the so called method of Tamm-Dancoff. Since linear combinations of the functions $\partial \Phi / \partial \alpha_\mu$ do not belong in general to the family of the functions Φ there is no guarantee that the eigenvalues E_r of eq. (1.11) are larger than E_0 . Some may be smaller and then we arrive at an inconsistency — excited states with an energy lower than the ground state. This type of inconsistency is avoided in the RPA as well shall see.

1.4 — Main concepts in the RPA

We look for a description of non stationary states of our system. Assume that the states in which the system finds itself in successive instants of time, for appropriate initial conditions, may be well represented by functions of the family $\{\Phi(x; \alpha_\mu)\}$. The function which best represents the state of the system at time t should be some function $\Phi(x; \alpha_\mu(t))$. The parameters α_μ become now time-dependent and eq. (1.5) should provide us with the law for their time evolution. However we must allow the parameters α_μ to become complex. We replace them by

$$\tilde{\gamma}_\mu = \alpha_\mu + i\beta_\mu \quad (1.12)$$

where α_μ and β_μ are real. The initial family $\{\Phi(x; \alpha_\mu)\}$ is therefore replaced by the family $\{\Phi(x; \tilde{\gamma}_\mu)\}$, where the functions $\Phi(x; \tilde{\gamma}_\mu)$ are defined by expanding $\Phi(x; \alpha_\mu)$ in a Taylor series in α_μ and replacing afterwards α_μ by $\tilde{\gamma}_\mu$. (Notice that the functions $\Phi(x; \tilde{\gamma}_\mu)$ are no longer necessarily normalized). For small $\tilde{\gamma}_\mu$ we can write (1), up to second order in $\tilde{\gamma}_\mu$,

$$\frac{(\Phi | H | \Phi)}{(\Phi | \Phi)} = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} [(\tilde{\gamma}_\mu^* \tilde{\gamma}_\nu^* + \tilde{\gamma}_\mu \tilde{\gamma}_\nu) B_{\mu, \nu} + 2 \tilde{\gamma}_\mu^* \tilde{\gamma}_\nu A_{\mu, \nu}] \quad (1.13)$$

where

$$B_{\mu, \nu} = \left[\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \alpha_\mu \partial \alpha_\nu} | H | \Phi \right) - E_0 \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \alpha_\mu \partial \alpha_\nu} | \Phi \right) \right]_{\alpha_\rho = 0} \quad (1.14)$$

$$A_{\mu, \nu} = \left[\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_\mu} | H | \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_\nu} \right) - E_0 \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_\mu} | \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_\nu} \right) \right]_{\alpha_\rho = 0}$$

The stability of our wave function for the ground state requires that E_0 is still the minimum value of $(\Phi | H | \Phi) / (\Phi | \Phi)$, even when the parameters α_μ are replaced by the $\tilde{\gamma}_\mu$. Then it follows that the quadratic form in the right hand side of eq. (1.13) is necessarily positive definite. This has important consequences for the coefficients $B_{\mu, \nu}$ and $A_{\mu, \nu}$ which, however, we will not discuss. We also have

$$-i [(\dot{\delta} \Phi | \dot{\Phi}) - (\dot{\Phi} | \dot{\delta} \Phi)] = -i \sum_{\mu, \nu} (\dot{\delta} \tilde{\gamma}_\mu^* \dot{\tilde{\gamma}}_\nu - \dot{\tilde{\gamma}}_\mu^* \dot{\delta} \tilde{\gamma}_\nu) N_{\mu, \nu} \quad (1.15)$$

(1) This expression depends on the assumption that $\Phi(x; \alpha_\mu)$ is real. The general result is not, however, essentially different.

where

$$N_{\mu\nu} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_\mu} \middle| \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_\nu} \right). \quad (1.16)$$

Then eq. (1.5), with Ψ replaced by Φ , leads to the equations

$$\begin{cases} \sum_{\nu} (-i N_{\nu\mu} \dot{\gamma}_\nu + A_{\mu\nu} \gamma_\nu + B_{\mu\nu} \gamma_\nu^*) = 0 \\ \sum_{\nu} (i N_{\nu\mu} \dot{\gamma}_\nu^* + A_{\nu\mu} \gamma_\nu^* + B_{\nu\mu} \gamma_\nu) = 0 \end{cases} \quad (1.17)$$

which govern the time evolution of the parameters γ_μ . If we assume a time dependence of the form

$$\gamma_\mu(t) = \xi_\mu^{(r)} \exp(-i\omega_r t) + \eta_\mu^{(r)} \exp(i\omega_r t) \quad (1.18)$$

the following algebraic equations are obtained

$$\sum_{\nu} (-\omega_r N_{\mu\nu} \xi_\nu^{(r)} + A_{\mu\nu} \xi_\nu^{(r)} + B_{\mu\nu} \eta_\nu^{(r)}) = 0 \quad (1.19)$$

$$\sum_{\nu} (\omega_r N_{\nu\mu} \eta_\nu^{(r)} + A_{\nu\mu} \eta_\nu^{(r)} + B_{\nu\mu} \xi_\nu^{(r)}) = 0 \quad (1.20)$$

which are the analogue of the RPA equations for our model. Since the quantities $N_{\mu\nu}$, $A_{\mu\nu}$ and $B_{\mu\nu}$ are real (with our simplifying assumptions) and since E_0 is the minimum of $(\Phi | H | \Phi) / (\Phi | \Phi)$ it follows that the eigenfrequencies ω_r are real and that the eigenvectors $(\xi_\nu^{(r)}, \eta_\nu^{(r)})$ may be chosen real, as it has been done already. Since the matrices $N_{\mu\nu}$, $A_{\mu\nu}$ and $B_{\mu\nu}$ are symmetric, it follows that the eigenfrequencies ω_r appear in pairs with opposite signs. (See section 3 below for detailed proofs of analogous statements). If $(\xi_\mu^{(r)}, \eta_\mu^{(r)})$ is the eigenvector corresponding to the eigenvalue ω_r , the eigenvector $(\xi_\mu^{(-r)}, \eta_\mu^{(-r)})$ corresponding to the eigenvalue $\omega_{-r} = -\omega_r$ is given by $\xi_\mu^{(-r)} = \eta_\mu^{(r)}$, $\eta_\mu^{(-r)} = \xi_\mu^{(r)}$.

1.5 — *Physical interpretation of the RPA*

Let us consider again eqs. (1.13) and (1.15) and eq. (1.5) with Ψ replaced by Φ . Since eq. (1.5) is valid for arbitrary $\delta \gamma_\mu$, as long

as $\gamma_\mu(t)$ satisfies eq. (1.17), it remains true if we replace $\delta \gamma_\mu$ by $\dot{\gamma}_\mu(t)$. We may then write eq. (1.13) in the form

$$\frac{(\Phi | H | \Phi)}{(\Phi | \Phi)} = E_0 + \frac{i}{2} \sum_{\mu \nu} (\dot{\gamma}_\mu^* \dot{\gamma}_\nu - \dot{\gamma}_\mu \dot{\gamma}_\nu^*) N_{\mu \nu}.$$

For a $\gamma_\mu(t)$ as given by eq. (1.18) we have

$$\frac{(\Phi | H | \Phi)}{(\Phi | \Phi)} - E_0 = \omega_r \sum_{\mu \nu} (\xi_\mu^{(r)} \xi_\nu^{(r)} - \eta_\mu^{(r)} \eta_\nu^{(r)}) N_{\mu \nu}. \quad (1.21)$$

Since the left-hand-side of this equation is positive the co-factor of ω_r has the same sign as ω_r . In order to interpret the right-hand-side of eq. (1.21) we consider the time-dependent wave function

$$\Psi(t) = \Psi_0 e^{-i \varepsilon_0 t} + C_r \Psi_r e^{-i \varepsilon_r t} \quad (1.22)$$

where Ψ_0 , ε_0 and Ψ_r , ε_r are exact eigenfunctions and eigenvalues of H [eq. (1.1)] and C_r is small. Up to second order in C_r we have

$$\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \varepsilon_0 + (\varepsilon_r - \varepsilon_0) C_r^* C_r. \quad (1.23)$$

Comparing with eq. (1.21) it seems natural, for a positive ω_r , to identify ω_r with excitation energy $(\varepsilon_r - \varepsilon_0)$ and to identify

$$\sum_{\mu \nu} (\xi_\mu^{(r)} \xi_\nu^{(r)} - \eta_\mu^{(r)} \eta_\nu^{(r)}) N_{\mu \nu}$$

with the transition probability $C_r^* C_r$.

The interpretation given is confirmed if we consider the following expectation values of some arbitrary operator M , up to first order in the small quantities $\dot{\gamma}_\mu$ and C_r ,

$$\begin{aligned} \frac{(\Phi | M | \Phi)}{(\Phi | \Phi)} &= (\Phi | M | \Phi)_{\alpha \rho} = 0 + \sum_{\mu} (\dot{\gamma}_\mu^* + \dot{\gamma}_\mu) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_\mu} | M | \Phi \right)_{\alpha \rho} = 0 \\ &= (\Phi | M | \Phi)_{\alpha \rho} = 0 + \sum_{\mu} (\xi_\mu^{(r)} + \eta_\mu^{(r)}) (e^{i \omega_r t} + e^{-i \omega_r t}) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_\mu} | M | \Phi \right)_{\alpha \rho} = 0 \end{aligned} \quad (1.24)$$

and

$$\frac{\langle \Psi | M | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \langle \Psi_0 | M | \Psi_0 \rangle \quad (1.25)$$

$$+ e^{i(\epsilon_r - \epsilon_0)t} C_r^* \langle \Psi_r | M | \Psi_0 \rangle + e^{-i(\epsilon_r - \epsilon_0)t} C_r \langle \Psi_0 | M | \Psi_r \rangle$$

Indeed, ω_r plays in eq. (1.24) the same role as $\epsilon_r - \epsilon_0$ in eq. (1.25). Moreover $C_r^* \langle \Psi_r | M | \Psi_0 \rangle$ corresponds to

$$\sum_{\nu} (\xi_{\mu}^{(r)} + \eta_{\mu}^{(r)}) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_{\mu}} | M | \Phi \right)_{\sigma_{\rho}} = 0$$

if ω_r is positive. Therefore, the matrix element $\langle \Psi_r | M | \Psi_0 \rangle$ should be identified with

$$\left[\sum_{\mu \nu} (\xi_{\mu}^{(r)} \xi_{\nu}^{(r)} - \eta_{\mu}^{(r)} \eta_{\nu}^{(r)}) N_{\mu \nu} \right]^{-\frac{1}{2}} \times \sum_{\mu} (\xi_{\mu}^{(r)} + \eta_{\mu}^{(r)}) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_{\mu}} | M | \Phi \right)_{\sigma_{\rho}} = 0$$

The present method provides us, therefore, with a consistent procedure for calculating excitation energies and transition amplitudes and is free of the inconsistency of the method previously described, since it is the positive ω_r which play the role of excitation energies. We remark, however, that by neglecting the terms in $B_{\mu \nu}$ in eqs. (1.19) and (1.20) we recover eq. (1.11) and, therefore, the previous method.

1.6—Orthonormality relations of the RPA eigenvectors

If we add the equations obtained by summing over μ the product of eq. (1.19) by $\xi_{\mu}^{(s)}$ and the product of eq. (1.20) by $\eta_{\mu}^{(s)}$, it may be shown that

$$(\omega_s - \omega_r) \sum_{\mu \nu} (\xi_{\mu}^{(s)} \xi_{\nu}^{(r)} - \eta_{\mu}^{(s)} \eta_{\nu}^{(r)}) N_{\mu \nu} = 0.$$

The orthogonality relations follow

$$\sum_{\mu \nu} (\xi_{\mu}^{(s)} \xi_{\nu}^{(r)} - \eta_{\mu}^{(s)} \eta_{\nu}^{(r)}) N_{\mu \nu} = 0, \quad (\text{if } \omega_r \neq \omega_s). \quad (1.26)$$

From eq. (1.21) it follows that it is possible to normalize the eigenvectors $(\xi_{\mu}^{(r)} \eta_{\mu}^{(r)})$ according to

$$\sum_{\mu \nu} (\xi_{\mu}^{(r)} \xi_{\nu}^{(r)} - \eta_{\mu}^{(r)} \eta_{\nu}^{(r)}) N_{\mu \nu} = \frac{\omega_r}{|\omega_r|}. \quad (1.27)$$

This normalization is useful and is frequently adopted. (Notice that the quantities $\xi_{\mu}^{(r)}$, $\eta_{\mu}^{(r)}$ we have used up to now were infinitesimals, therefore they were not normalized to unity). In general one may impose the orthonormality conditions

$$\sum_{\mu, \nu} (\xi_{\mu}^{(s)} \xi_{\nu}^{(r)} - \eta_{\mu}^{(s)} \eta_{\nu}^{(r)}) N_{\mu, \nu} = \frac{\omega_r}{|\omega_r|} \delta_{rs} \quad (1.28)$$

which are obvious, from what has been said, if no two ω_r are equal.

2 — THE HARTREE-FOCK METHOD

2.1 — Parametrization of a general Slater determinant

We consider a system of N fermions. The hamiltonian may be written

$$H = T + V \quad (2.1)$$

where T is a one-body operator and V is a two-body operator. The operator T is, therefore, the kinetic energy plus the potential energy due to some external field $U(x)$

$$T = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2m} p_i^2 + U(x_i) \right) \quad (2.2)$$

while V is the potential energy of the two-body interactions

$$V = \sum_{i < j=1}^N v(x_i, x_j). \quad (2.3)$$

The coordinate x_i stands for the space, spin and iso-spin coordinates of particle i

$$x_i = (r_i, \tau_i, \sigma_i). \quad (2.4)$$

We denote by t_i the sum of the kinetic energy and of the external potential energy of particle i

$$t_i = \frac{1}{2m} p_i^2 + U(x_i). \quad (2.5)$$

The potential energy of the pair i, j is

$$v_{ij} = v(x_i, x_j). \quad (2.6)$$

If we consider N linearly independent single-particle wave functions $\phi_\alpha(x)$, the Slater determinant

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_1(x_2) & \dots & \phi_1(x_N) \\ \phi_2(x_1) & \phi_2(x_2) & \dots & \phi_2(x_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_N(x_1) & \phi_N(x_2) & \dots & \phi_N(x_N) \end{vmatrix} \quad (2.7)$$

is obviously antisymmetric with respect to the interchange of the coordinates of any pair of particles, so, in agreement with the Pauli principle, it represents a possible physical state of our system. We now assume that the behaviour of our system may be well described by Slater determinants. This assumption leads to the definition of the class of functions where we are going to look for a description of the ground state and of non stationary states (in general obtained by slightly deforming the ground state): we consider the class of Slater determinants of orthonormal single particle functions. It is always possible (even if the $\phi_\alpha(x)$ are not orthonormal) to construct orthonormal linear combinations $\xi_\alpha(x)$ of the functions $\phi_\alpha(x)$, $\xi_\alpha(x) = \sum_{\beta=1}^N C_{\alpha\beta} \phi_\beta(x)$. Now, the Slater determinant of the $\xi_\alpha(x)$ differs from the Slater determinant of the $\phi_\alpha(x)$ on a numerical factor, namely the determinant of the coefficients $C_{\alpha\beta}$. The two Slater determinants are, therefore, physically equivalent, so we would gain nothing by dropping the restriction of orthonormality on the functions $\phi_\alpha(x)$. The Slater determinant $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ is normalized if the functions $\phi_\alpha(x)$ are orthonormal. Now let

$$\Phi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_1(x_2) & \dots & \varphi_1(x_N) \\ \varphi_2(x_1) & \varphi_2(x_2) & \dots & \varphi_2(x_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_N(x_1) & \varphi_N(x_2) & \dots & \varphi_N(x_N) \end{vmatrix} \quad (2.8)$$

be the Slater determinant [of orthonormal single-particle functions $\varphi_\alpha(x)$] which minimizes the expectation value of the hamiltonian. In order to introduce a convenient parametrization of the general Slater determinant $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ we expand the set of the wave functions $\varphi_\alpha(x)$ ($\alpha=1, 2, \dots, N$) into a complet set of orthonormal functions $\varphi_i(x)$ ($i=1, 2, \dots, N, N+1, \dots, \infty$). (This may be done in infinitely many ways). We also expand the set of the functions $\phi_\alpha(x)$ ($\alpha=1, 2, \dots, N$) into another orthonormal set $\phi_i(x)$ ($i=1, 2, \dots, \infty$). From now on we will denote by greek letters $\alpha, \beta, \gamma, \dots$, the labels

of the single-particle states φ_i present in Φ (hole states) and by the letters m, n, p, \dots we will denote the labels of the single-particle states φ_i not present in Φ (particle states). The letters i, j, \dots may denote both types of labels.

The transformation of the orthonormal set of single-particle functions $\varphi_i(x)$ into the orthonormal set of the functions $\psi_i(x)$ defines a linear operator u such that

$$\psi_i = u \varphi_i. \quad (2.9)$$

Since both sets are orthonormal, the operator u is unitary

$$u u^\dagger = u^\dagger u = I. \quad (2.10)$$

Therefore we may write

$$u = e^{i s} \quad (2.11)$$

where s is an hermitian operator,

$$s = s^\dagger. \quad (2.12)$$

The transformation of the functions $\varphi_i(x)$ into the functions $\psi_i(x)$ induces a transformation of the N -particle product wave functions

$$\varphi_{i_1}(x_1) \varphi_{i_2}(x_2) \dots \varphi_{i_N}(x_N)$$

into the functions

$$\begin{aligned} \psi_{i_1}(x_1) \psi_{i_2}(x_2) \dots \psi_{i_N}(x_N) &= u_1 u_2 \dots u_N \varphi_{i_1}(x_1) \varphi_{i_2}(x_2) \dots \varphi_{i_N}(x_N) \\ &= e^{i(s_1 + s_2 + \dots + s_N)} \varphi_{i_1}(x_1) \varphi_{i_2}(x_2) \dots \varphi_{i_N}(x_N). \end{aligned} \quad (2.13)$$

The label i in the operators u_i, s_i means that these operators act on functions of the coordinate x_i . The several u_i and the several s_i commute, therefore, between themselves. Let

$$\mathcal{U} = \prod_{i=1}^N u_i \quad (2.14)$$

$$S = \sum_{i=1}^N s_i \quad (2.15)$$

From eq. (2.13) it follows that a general Slater determinant Ψ is related to a particular Slater determinant Φ through the equation

$$\Psi = e^{i S} \Phi \quad (2.16)$$

The operator S replaces the variational parameters α_μ of the previous section. However, since there are several S connecting a given Ψ with a given Φ , a particular S contains in general much arbitrariness. In the next section we will show how to get rid of what is not essential.

2.2 — *The Hartree-Fock equations*

When S tends to zero Ψ approaches Φ . We are going to consider only functions Ψ near to the function Φ . Therefore we replace eq. (2.16) by

$$\Psi_\gamma = e^{i\gamma S} \Phi \quad (2.16')$$

where γ is an infinitesimal real parameter introduced in order to enable one to keep easily track of orders of magnitude. We now define hermitian operators S' and S'' which are related to the operator S ,

$$S' = \sum_{i=1}^N s'_i \quad (2.17)$$

$$S'' = \sum_{i=1}^N s''_i$$

$$(\varphi_m | s' | \varphi_\alpha) = (\varphi_\alpha | s' | \varphi_m)^* = (\varphi_m | s | \varphi_\alpha) \quad (2.18)$$

$$(\varphi_m | s' | \varphi_n) = (\varphi_\alpha | s' | \varphi_\beta) = 0$$

$$(\varphi_m | s'' | \varphi_\alpha) = (\varphi_\alpha | s'' | \varphi_m)^* = 0,$$

$$(\varphi_\alpha | s'' | \varphi_\beta) = (\varphi_\alpha | s | \varphi_\beta), \quad (2.19)$$

$$(\varphi_m | s'' | \varphi_n) = (\varphi_m | s | \varphi_n).$$

Then we have

$$\begin{aligned} s &= s' + s'', \\ S &= S' + S''. \end{aligned} \quad (2.20)$$

It may now be verified that

$$e^{i\gamma S} = e^{i\gamma\{S' + i\frac{\gamma^2}{2!}[S', S''] + 0(\gamma^3)\}} e^{i\gamma S''}. \quad (2.21)$$

The operator $\exp(i\gamma S'')$ acting on Φ just produces a phase factor. This is so because the functions $\varphi'_\alpha(x) = \exp(i\gamma s'') \varphi_\alpha(x)$ are ortho-

normal linear combinations of the functions $\varphi_\alpha(x)$ (notice that $(\varphi_m | s'' | \varphi_\alpha) = (\varphi_\alpha | s'' | \varphi_m) = 0$). In order to obtain the Hartree-Fock equations we expand the expectation value

$$\langle \Psi_\gamma | H | \Psi_\gamma \rangle = \langle \Phi | e^{-i\gamma S} H e^{i\gamma S} | \Phi \rangle$$

up to second order in γ . Then we have

$$\begin{aligned} \langle \Psi_\gamma | H | \Psi_\gamma \rangle &= \langle \Phi | H | \Phi \rangle - i\gamma \langle \Phi | [S, H] | \Phi \rangle \\ &\quad - \frac{1}{2!} \gamma^2 \langle \Phi | [S, [S, H]] | \Phi \rangle + 0(\gamma^3). \end{aligned} \quad (2.22)$$

In agreement with eq. (2.21) and with the remarks following that equation, we may replace, in eq. (2.22), the operator S by $S' + i\frac{\gamma}{2}[S', S'']$.

Since $\langle \Psi_\gamma | H | \Psi_\gamma \rangle$ must be stationary for $\Psi_\gamma = \Phi$, it follows that the terms linear in γ must be zero for arbitrary S ,

$$\langle \Phi | [S, H] | \Phi \rangle = \langle \Phi | [S', H] | \Phi \rangle = 0 \quad (2.23)$$

showing that the component S'' of S is not relevant as far as the stationary condition is concerned. Now we have

$$[S', H] = \sum_{i=1}^N [s'_i, t_i] + \sum_{i < j=1}^N [(s'_i + s'_j), v_{ij}] \quad (2.24)$$

Making use of the general expressions for the expectation values of one- and two-body operators with respect to a Slater determinant, we obtain

$$\begin{aligned} \langle \Phi | [S', H] | \Phi \rangle &= \sum_{\alpha} (\varphi_{\alpha} | [s', t] | \varphi_{\alpha}) \\ &\quad + \sum_{\alpha < \beta} (\varphi_{\alpha} \varphi_{\beta} | [(s'_1 + s'_2), v_{12}] | \varphi_{\alpha} \varphi_{\beta}) \\ &\quad - \sum_{\alpha < \beta} (\varphi_{\alpha} \varphi_{\beta} | [(s'_1 + s'_2), v_{12}] | \varphi_{\beta} \varphi_{\alpha}) = 0. \end{aligned} \quad (2.25)$$

If we consider the operator \hat{v} such that

$$(\varphi_i \varphi_j | \hat{v} | \varphi_k \varphi_l) = (\varphi_i \varphi_j | v | \varphi_k \varphi_l) - (\varphi_i \varphi_j | v | \varphi_l \varphi_k) \quad (2.26)$$

we may replace eq. (2.25) by

$$\sum_{\alpha} (\varphi_{\alpha} | [s', t] | \varphi_{\alpha}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (\varphi_{\alpha} \varphi_{\beta} | [(s'_1 + s_2), \hat{v}_{12}] | \varphi_{\alpha} \varphi_{\beta}) = 0 \quad (2.27)$$

where the factor 1/2 comes from the equality $\sum_{\alpha < \beta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta}$. With the help of standard techniques of matrix quantum mechanics (such as manipulating the completeness relation $\sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = I$) and considering eq. (2.18) we may replace eq. (2.27) by

$$\sum_{\alpha, m} [s_{\alpha, m} (t_{m, \alpha} + \sum_{\beta} \hat{v}_{m\beta, \alpha\beta}) - (t_{\alpha, m} + \sum_{\beta} \hat{v}_{\alpha\beta, m}) s_{m, \alpha}] = 0 \quad (2.28)$$

where we have introduced the notation

$$t_{i, j} = (\varphi_i | t | \varphi_j), v_{i, j, k, l} = (\varphi_i \varphi_j | v | \varphi_k \varphi_l), \text{ etc.} \quad (2.29)$$

Since the real and imaginary parts of $s_{\alpha, m}$ are arbitrary it follows that we may regard $s_{\alpha, m}$ and $s_{m, \alpha}$ as independent, although $s_{\alpha, m} = s_{m, \alpha}^*$. In order to see this it is enough to remark that if we replace $s_{\alpha, m}$ by $i s_{\alpha, m}$, then $s_{m, \alpha}$ should be replaced by $-i s_{m, \alpha}$. The co-factors of $s_{\alpha, m}$ and $s_{m, \alpha}$ in eq. (2.28) must, therefore, be both equal to zero.

$$t_{\alpha, m} + \sum_{\beta} \hat{v}_{\alpha\beta, m\beta} = 0. \quad (2.30)$$

Consider now the operator h such that

$$h_{i, j} = t_{i, j} + \sum_{\beta} \hat{v}_{i\beta, j\beta}. \quad (2.31)$$

The operator h is obviously hermitian. The matrices $h_{\alpha, \beta}$ and $h_{m, n}$ are diagonalised by a canonical transformation of the type of $\exp(is'')$ which does not mix hole states φ_{α} with particle states φ_m . Since such a canonical transformation leaves both eq. (2.30) and the Slater determinant Φ invariant, it follows that eq. (2.30) may be replaced, without loss of generality, by the following eigenvalue equations

$$t_{i, j} + \sum_{\beta} \hat{v}_{i\beta, j\beta} = \varepsilon_i \delta_{i, j}. \quad (2.32)$$

These are the Hartree-Fock equations, which determine the best single particle orbitals describing the structure of the ground state and, obviously, may also be written

$$h \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i. \quad (2.32')$$

3—SECOND ORDER VARIATION

3.1—The stability condition

If eqs. (2.32) are satisfied we may be sure only that the expectation value $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ is stationary when Ψ approaches Φ , but we do not know yet what type of stationary point we are dealing with. Since we are looking for a minimum, we ask under what conditions is the expectation value $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ never smaller than $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$, at least for a Ψ close to Φ . In order to investigate this point we consider again eq. (2.22). Taking into account eq. (2.23) (the stationary condition) and eq. (2.21) we may write, up to second order in γ

$$\begin{aligned} \langle \Psi_\gamma | H | \Psi_\gamma \rangle - \langle \Phi | H | \Phi \rangle &= -\frac{\gamma^2}{2!} \langle \Phi | [S, [S, H]] | \Phi \rangle \\ &= -\frac{\gamma^2}{2!} \langle \Phi | [S', [S', H]] | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (3.1)$$

The right hand side of this equation must be a non-negative quantity (either positive or zero). If it were not we should look for a better solution of the Hartree-Fock equations. We may write

$$\begin{aligned} [S', [S', H]] &= -\sum_{i=1}^N [s'_i, [s'_i, t_i]] \\ &+ \sum_{i < j=1}^N [(s'_i + s'_j), [(s'_i + s'_j), v_{ij}]]. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Therefore we have

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \langle \Phi | [S', [S', H]] | \Phi \rangle &= -\frac{1}{2} \left\{ \sum_{\alpha} (\varphi_{\alpha} | [s', [s', t]] | \varphi_{\alpha}) \right. \\ &+ \sum_{\alpha < \beta} (\varphi_{\alpha} \varphi_{\beta} | [(s'_1 + s'_2), [(s'_1 + s'_2), v_{12}]] | \varphi_{\alpha} \varphi_{\alpha}) \\ &\left. - \sum_{\alpha < \beta} (\varphi_{\alpha} \varphi_{\beta} | [(s'_1 + s'_2), [(s'_1 + s'_2), v_{12}]] | \varphi_{\beta} \varphi_{\alpha}) \right\} \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{1}{2} \left\{ \sum_x (\varphi_x | [s', [s', t]] | \varphi_x) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (\varphi_\alpha \varphi_\beta | [(s'_1 + s'_2), [(s'_1 + s'_2), \hat{v}_{12}]] | \varphi_\alpha \varphi_\beta) \right\} \quad (3.4)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{\alpha m} s_{\alpha, m} s_{m, \alpha} (\varepsilon_m - \varepsilon_\alpha) + \sum_{\alpha\beta, mn} (s_{\alpha, m} \hat{v}_{m\beta, \alpha n} s_{n, \beta} \\
 &\quad - \frac{1}{2} s_{\alpha, m} s_{\beta, n} \hat{v}_{mn, \alpha\beta} - \frac{1}{2} \hat{v}_{\alpha\beta, mn} s_{m, \alpha} s_{n, \beta}) \quad (3.5)
 \end{aligned}$$

where use has been made of eq. (2.32). The right hand side of eq. (3.5) is a quadratic form in the quantities $s_{\alpha, m}$ and $s_{\alpha, m}^* = s_{m, \alpha}$. Since it must be non-negative, the eigenvalues λ of the following eigenvalue equation

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon_m - \varepsilon_\alpha) s_{\alpha, m} + \sum_{\beta n} (s_{\beta, n} \hat{v}_{\alpha n, m\beta} - s_{n, \beta} \hat{v}_{\alpha\beta, mn}) &= \lambda s_{\alpha, m} \\
 (\varepsilon_m - \varepsilon_\alpha) s_{m, \alpha} + \sum_{\beta n} (s_{n, \beta} \hat{v}_{m\beta, \alpha n} - s_{\beta, n} \hat{v}_{mn, \alpha\beta}) &= \lambda s_{m, \alpha} \quad (3.6)
 \end{aligned}$$

must also be non negative (3) — they are either positive or zero. Notice that eq. (3.6) insures that the quadratic form in eq. (3.5) is stationary with respect to variations of $s_{\alpha, m}$ subject to the restriction

$$\sum_{\alpha, m} s_{\alpha, m} s_{m, \alpha} = \sum_{\alpha, m} s_{\alpha, m} s_{\alpha, m}^* = 1.$$

If the $s_{\alpha, m}$ satisfy this normalization, the lowest eigenvalue λ is also the minimum value of the right hand side of eq. (3.5), which is attained if $s_{\alpha, m}$ is the eigensolution of eq. (3.6) corresponding to the lowest eigenvalue. There will be always zero eigenvalues if there are operators s such that Φ is not their eigenstate and which commute with the hamiltonian (4). Of course, Φ must not be an eigenstate of S because then we would have $\exp(is)\Phi = \exp(i\sigma)\Phi$, where σ is a real number, so the corresponding $s'_{\alpha, m}$ would be zero. Examples of operators S commuting with H which give rise to zero eigenvalues are the total momentum P and, for an asymmetric nucleus, the angular momentum J . It should be emphasized that the eigenvalues λ have no physical meaning although, if we neglect the matrix elements of the type of $\hat{v}_{\alpha\beta, mn}$, then eqs. (3.5) reduce to the so called Tamm-Dancoff equations

$$(\varepsilon_m - \varepsilon_\alpha) C_{\alpha m} + \sum_{\beta, m} C_{\beta n} \hat{v}_{\alpha n, m\beta} = E C_{\alpha m} \quad (3.7)$$

It is seen that the eigenvalues λ of eq. (3.6) are here replaced by the excitation energies E . There is however no guarantee that the eigenvalues E are positive (since the terms in $\hat{v}_{\alpha\beta, mn}$ are absent). This is a weakness of the Tamm-Dancoff method which is avoided by the RPA method.

3.2 — *The RPA equations*

We use now the variational principle expressed by eq. (1.5) to determine the best time evolution of Slater determinants Ψ_γ near the Slater determinant Φ , assuming we restrict ourselves to that class of functions. We allow, therefore, the operator S to become time-dependent. We may write, up to second order in γ

$$\begin{aligned} & -i \{ \langle \delta \Psi_\gamma | \dot{\Psi}_\gamma \rangle - \langle \dot{\Psi}_\gamma | \delta \Psi_\gamma \rangle \} \\ & = -i \gamma^2 \langle \Phi | [\delta S, \dot{S}] | \Phi \rangle = -i \gamma^2 \langle \Phi | [\delta \dot{S}', S'] | \Phi \rangle \end{aligned} \quad (3.8)$$

where use has been made again of eq. (2.21). Now we have

$$[\delta S', \dot{S}'] = \sum_{i=1}^N [\delta s'_i, \dot{s}'_i]$$

so that

$$-i \langle \Phi | [\delta S', \dot{S}'] | \Phi \rangle = -i \sum_{\alpha} (\varphi_{\alpha} | [\delta s', \dot{s}'] | \varphi_{\alpha}). \quad (3.9)$$

Finally the variational principle

$$-i (\langle \delta \Psi_\gamma | \dot{\Psi}_\gamma \rangle - \langle \dot{\Psi}_\gamma | \delta \Psi_\gamma \rangle) + \delta \langle \Psi_\gamma | H | \Psi_\gamma \rangle = 0,$$

which now may be replaced by

$$-i \langle \Phi | [\delta S', \dot{S}'] | \Phi \rangle - \frac{1}{2} \delta \langle \Phi | [S', [S', H]] | \Phi \rangle = 0. \quad (3.10)$$

leads, with the help of eqs. (3.4) and (3.9), to the following first order linear differential system

$$\left\{ \begin{aligned} i \dot{s}_{\alpha, m} + (\varepsilon_m - \varepsilon_{\alpha}) s_{\alpha, m} + \sum_{\beta n} (s_{\beta, n} \hat{v}_{\alpha n, m \beta} - s_{n, \beta} \hat{v}_{\alpha \beta, m n}) &= 0, \\ -i \dot{s}_{m, \alpha} + (\varepsilon_m - \varepsilon_{\alpha}) s_{m, \alpha} + \sum_{\beta n} (s_{n, \beta} \hat{v}_{m \beta, \alpha n} - s_{\beta, n} \hat{v}_{m n, \alpha \beta}) &= 0. \end{aligned} \right. \quad (3.11)$$

This may be written in a more compact form if we introduce a quantity $\theta(ij)$ defined by

$$\theta(\alpha m) = -\theta(m \alpha) = 1, \quad \theta(\alpha \beta) = \theta(m n) = 0. \quad (3.12)$$

We have then

$$i s'_{ij} + (\epsilon_j - \epsilon_i) s'_{ij} + \sum_{kl} \hat{v}_{il,jk} \theta(kl) s'_{kl} = 0 \quad (3.13)$$

where s'_{ij} is given by eqs. (2.18). We look now for a solution of these equations in the form

$$s'_{ij}(t) = \theta(ij) (\phi_{ij}^{(r)} e^{i\omega_r t} - \phi_{ji}^{(r)*} e^{-i\omega_r^* t}) \quad (3.14)$$

where the quantities $\phi_{ij}^{(r)}$ are such that $\phi_{\alpha\beta}^{(r)} = \phi_{m n}^{(r)} = 0$ (remember that s'_{ij} must be hermitian). Then we arrive at the RPA equations in the form adopted by Fukuda *et al.* (5).

$$\omega_r \phi_{ij}^{(r)} = (\epsilon_j - \epsilon_i) \phi_{ij}^{(r)} + \theta(ij) \sum_{kl} \hat{v}_{il,jk} \phi_{kl}^{(r)}. \quad (3.15)$$

The quantities ω_r are the normal frequencies of our system and the amplitudes $\phi_{ij}^{(r)}$ describe the normal modes. A more physical interpretation of these equations will be given later.

3.3 — *Mathematical properties of RPA equations*

Let us consider again eq. (3.10). This equation is satisfied for arbitrary variations $\delta S'$ as long as S' is such that eq. (3.13) is verified. It follows that eq. (3.10) remains satisfied if we replace in it $\delta S'$ by S' . Therefore we may write, with the help of eq. (3.1),

$$\begin{aligned} \langle \Psi_\gamma | H | \Psi_\gamma \rangle - \langle \Phi | H | \Phi \rangle &= \frac{i\gamma^2}{2} \langle \Phi | [S', S'] | \Phi \rangle \\ &= \frac{i\gamma^2}{2} \sum_{\alpha m} (s_{\alpha, m} \dot{s}_{m, \alpha} - \dot{s}_{\alpha, m} s_{m, \alpha}). \end{aligned} \quad (3.16)$$

For a $s_{\alpha, m}$ as given by eq. (3.14) we obtain

$$\begin{aligned} \langle \Psi_\gamma | H | \Psi_\gamma \rangle - \langle \Phi | H | \Phi \rangle &= \frac{\gamma^2}{2} (\omega_r^* + \omega_r) \sum_{\alpha m} (\phi_{\alpha m}^{(r)*} \dot{\phi}_{\alpha m}^{(r)} - \dot{\phi}_{m \alpha}^{(r)*} \phi_{m \alpha}^{(r)}) \\ &= \frac{\gamma^2}{2} (\omega_r^* + \omega_r) \sum_{ij} \theta(ij) \phi_{ij}^{(r)*} \dot{\phi}_{ij}^{(r)}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Let us now multiply eq. (3.15) by $\phi_{ij}^{(r)*} \theta(ij)$ and let us sum over i, j . We have

$$\begin{aligned} \omega_r \sum_{ij} \phi_{ij}^{(r)*} \theta(ij) \phi_{ij}^{(r)} &= \sum_{ij} \phi_{ij}^{(r)*} \theta(ij) (\varepsilon_j - \varepsilon_i) \phi_{ij}^{(r)} \\ &+ \sum_{ij,kl} \phi_{ij}^{(r)*} \hat{v}_{il,jk} \phi_{kl}^{(r)}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

It is a simple matter to verify that the right hand side of eq. (3.18) and the co-factor of ω_r are real quantities. Therefore ω_r is also real unless its co-factor is zero. But if the co-factor is zero, the right-hand-side of eq. (3.17) is also zero, so the minimum value of $\langle \Psi_\gamma | H | \Psi_\gamma \rangle$ is attained for the $s'_{i,j}$ under consideration (eq. 3.14). The quantity $s'_{\alpha,m}$ is therefore a solution of eq. (3.6) corresponding to an eigenvalue λ equal to zero, but then it follows [taking again into account eq. (3.14)] that the eigenvalue ω_r in eq. (3.15) is zero. Summarizing, the eigenvalues ω^r of eq. (3.15) are always real. If the quantity

$$\sum_{ij} \theta(ij) \phi_{ij}^{(r)*} \phi_{ij}^{(r)}$$

is zero, then ω_r is also zero. Moreover, since the quantity

$$\langle \Psi_\gamma | H | \Psi_\gamma \rangle - \langle \Phi | H | \Phi \rangle = \gamma^2 \omega_r \sum_{ij} \theta(ij) \phi_{ij}^{(r)*} \phi_{ij}^{(r)} \quad (3.19)$$

is non-negative, it is seen that ω_r has the same sign as $\sum_{ij} \theta(ij) \phi_{ij}^{(r)*} \phi_{ij}^{(r)}$.

We do not wish to discuss here the case of zero frequencies. For that the reader is referred to Thouless's paper (3). Since such frequencies are related to the degeneracies of the hamiltonian H , we may suppose that those degeneracies have been removed by adding to the hamiltonian a perturbation small enough to be otherwise negligible. Then the quantity $\sum_{ij} \theta(ij) \phi_{ij}^{(r)*} \phi_{ij}^{(r)}$ is different from zero and it may be conveniently normalized to ± 1 ,

$$\sum_{ij} \theta(ij) \phi_{ij}^{(r)*} \phi_{ij}^{(r)} = \frac{\omega_r}{|\omega_r|} \quad (3.20)$$

Consider now two different eigenfrequencies ω_r and ω_s and the corresponding eigenvalue equations. By the usual technique (complex conjugation of the equation for ω_s , multiplication of this equation

by $\phi_{ij}^{(r)} \theta(ij)$, multiplication of the other equation by $\phi_{ij}^{(s)*} \theta(ij)$ and subtraction of the equations so obtained) it may be shown that

$$(\omega_r - \omega_s) \sum_{ij} \phi_{ij}^{(s)*} \theta(ij) \phi_{ij}^{(r)} = 0 \quad (3.21)$$

It follows that, for $\omega_r \neq \omega_s$, the amplitudes $\phi_{ij}^{(r)}$ and $\phi_{ij}^{(s)}$ are orthogonal in the following sense $\sum_{ij} \phi_{ij}^{(s)} \theta(ij) \phi_{ij}^{(r)} = 0$.

If the $\phi_{ij}^{(r)}$ are properly normalized we have, therefore (we do not wish to discuss explicitly the case of degenerate solutions, which involves no particular difficulty)

$$\sum_{ij} \phi_{ij}^{(s)*} \theta(ij) \phi_{ij}^{(r)} = \delta_{rs} \frac{\omega_r}{|\omega_r|}. \quad (3.22)$$

We will show now that, if $\phi_{ij}^{(r)}$ is an eigensolution of eq. (3.15) corresponding to the eigenvalue ω_r , then $\phi_{ji}^{(r)*} = \phi_{ij}^{(r)*}$ is an eigensolution corresponding to the eigenvalue $\omega_r = -\omega_r$. It is enough to consider the complex conjugate of eq. (3.15)

$$-\omega_r \phi_{ji}^{(r)*} = (\varepsilon_j - \varepsilon_i) \phi_{ji}^{(r)*} + \theta(ij) \sum_{kl} \hat{v}_{il,jk} \phi_{lk}^{(r)*}. \quad (3.15')$$

It may be shown that the amplitudes $\phi_{ij}^{(r)}$ form a complete set, meaning that any collection of quantities $m_{\alpha, m}$, $m_{m, \alpha}$ may be expanded as

$$m_{i,j} = \theta(ij) \sum_{r(\omega_r > 0)} (n_r \phi_{ij}^{(r)} - m_r \phi_{ji}^{(r)*}) \quad (3.23)$$

where the summation extends only over positive frequencies. A discussion of this point may be found elsewhere (6). Of course, from the orthonormality condition we have

$$\begin{aligned} n_r &= \sum_{ij} m_{i,j} \phi_{ij}^{(r)*}, \\ m_r &= \sum_{ij} m_{i,j} \phi_{ji}^{(r)}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Notice that if $m_{j,i} = m_{i,j}^*$ we have $n_r = m_r^*$.

3.4 — Physical interpretation of the RPA solutions

Let us consider again eq. (3.19), which involves an operator S as given by eq. (3.14) and let us assume that ω_r is positive and that $\phi_{ij}^{(r)}$ is normalized according to eq. (3.22). Then we may write

$$\langle \Psi_\gamma | H | \Psi_\gamma \rangle = \langle \Phi | H | \Phi \rangle + \omega_r \gamma^2. \quad (3.25)$$

Consider now the non-stationary state Ψ_c obtained by admitting a small component of the exact excited state Ψ_r to the exact ground state Ψ_o . Its time evolution is rigorously given by

$$\Psi_c(t) = \Psi_o e^{-i\varepsilon_o t} + c \Psi_r e^{-i\varepsilon_r t}. \quad (3.26)$$

The expectation value of H with respect to $\Psi_c(t)$ is given by

$$\frac{\langle \Psi_c(t) | H | \Psi_c(t) \rangle}{\langle \Psi_c(t) | \Psi_c(t) \rangle} = \varepsilon_o + c c^* (\varepsilon_r - \varepsilon_o). \quad (3.27)$$

This expression is correct up to second order in c . The comparison of this result, which is exact, with the approximate result expressed by eq. (3.25) suggests the interpretation of a (positive) ω_r as an excitation energy $\varepsilon_r - \varepsilon_o$. The correctness of this interpretation is confirmed if we consider also the expectation value of an arbitrary one-body operator

$$M = \sum_{i=1}^N m_i. \quad (3.28)$$

We have, indeed, up to first order in γ and for an operator S as given by eq. (3.14)

$$\begin{aligned} \langle \Psi_\gamma | M | \Psi_\gamma \rangle &= \langle \Phi | M | \Phi \rangle - i\gamma \langle \Phi | [S, M] | \Phi \rangle \\ &= \langle \Phi | M | \Phi \rangle - i\gamma \sum_{\alpha m} (s_{\alpha, m} m_{m, \alpha} - m_{\alpha, m} s_{m, \alpha}) \\ &= \langle \Phi | M | \Phi \rangle + (i\gamma)^* e^{i\omega_r t} \sum_{ij} \phi_{ij}^{(r)} m_{j,i} + (i\gamma) e^{-i\omega_r t} \sum_{ij} \phi_{ij}^{(r)*} m_{i,j} \end{aligned} \quad (3.29)$$

On the other hand we may write, up to first order in c

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Psi_c(t) | M | \Psi_c(t) \rangle}{\langle \Psi_c(t) | \Psi_c(t) \rangle} &= \langle \Psi_o | M | \Psi_o \rangle \\ &+ c^* e^{i(\varepsilon_r - \varepsilon_o) t} \langle \Psi_r | M | \Psi_o \rangle + c e^{-i(\varepsilon_r - \varepsilon_o) t} \langle \Psi_o | M | \Psi_r \rangle \end{aligned} \quad (3.30)$$

Comparing the rigorous eq. (3.30) with the approximate eq. (3.39), we not only find that ω_r plays the role of an excitation energy,

$$\omega_r \Rightarrow \varepsilon_r - \varepsilon_0, \quad (3.31)$$

but we also discover the significance of the amplitudes $\phi_{ij}^{(r)}$ which is provided by the following correspondence

$$\langle \Psi_r | M | \Psi_0 \rangle \Rightarrow m_r = \sum_{ij} \phi_{ij}^{(r)} m_{j,i} \quad (3.32)$$

[Notice that an abstract quantity m_r had been previously introduced in connection with eq. (3.24)]. This interpretation is confirmed if we compare the exact treatment of the polarization of a quantal system by an external time dependent perturbation with the approximate treatment based on the Hartree-Fock method.

Let us consider again a hermitian transition operator M as given by eq. (3.28). There is an important sum-rule referring to the transition amplitudes $\langle \Psi_r | M | \Psi_0 \rangle$: it is the so called Thomas-Reiche-Kuhn sum-rule

$$\begin{aligned} \sum_r (\varepsilon_r - \varepsilon_0) \langle \Psi_0 | M | \Psi_r \rangle \langle \Psi_r | M | \Psi_0 \rangle \\ = \frac{1}{2} \langle \Psi_0 | [M, [H, M]] | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (3.33)$$

A remarkable property of the time-dependent Hartree-Fock method or RPA is that it preserves this sum-rule (6). In order to prove this we define a time dependent operator $M(t)$ by

$$\begin{aligned} M(t) &= \sum_{i=1}^N m_i(t) \\ m_{i,j}(t) &= \theta(ij) \sum_{r(\omega_r > 0)} (m_r^* \phi_{ij}^{(r)} e^{i\omega_r t} - m_r \phi_{ji}^{(r)*} e^{-i\omega_r t}) \end{aligned} \quad (3.34)$$

The last equation does not refer to the matrix elements $m_{\alpha,\beta}(t)$, $m_{m,n}(t)$ which are not required in the proof. Taking into account eq. (3.23), with $n_r = m_r^*$, it follows that $M(0) = M$, if m_r is given by eq. (3.24). This is the reason why we have used the same letter to represent both operators M and $M(t)$. Moreover $m_{i,j}(t)$ satisfies eq. (3.13), (since it is a linear combination of solutions of the type of eq. (3.14)) so eq. (3.16) is applicable. Considering also eq. (3.1) we

may write (for an M' related to M in the same way as S' is related to S)

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \langle \Phi | [M, [H, M]] | \Phi \rangle &= \frac{i}{2} \langle \Phi | [M', \dot{M}'] | \Phi \rangle \\
 &= \frac{i}{2} \sum_{ij} m_{i,j} \dot{m}_{j,i} \theta(ij) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \theta(i) \sum_r (m_r^* \psi_{ij}^{(r)} e^{i\omega_r t} - m_r \psi_{ji}^{(r)*} e^{-i\omega_r t}) \\
 &\quad \times \sum_s \omega_s (m_s \psi_{ij}^{(s)*} e^{-i\omega_s t} - m_s^* \psi_{ji}^{(s)} e^{i\omega_s t}) \\
 &= \sum_{r(\omega_r > 0)} \omega_r m_r^* m_r.
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

Considering eqs. (3.31) and (3.32), the proof is completed. An important consequence of this result is that if $[M, H] = 0$ then we either have $m_r = 0$ or $\omega_r = 0$. This demonstrates again that the so called spurious states, generated by an operator M which commutes H , have zero energy.

The author wishes to thank Professors Luis M. Garrido and António da Silveira for the opportunity to organize the present notes which are based on lectures given in the 1967-68 Seminar of the Instituto de Física Teórica of the University of Barcelona and in the 1968-69 Physics Seminar of the Instituto de Alta Cultura, Lisboa.

REFERENCES

- (1) ROSENFELD, L. — Lecture. Notes on the Many-Body Problem, C. Fronsdal, Editor, p. 126, A. Benjamin, Inc., New York, 1962.
- (2) PROVIDÊNCIA, J. da — *Portgal Phys.*, **4**, 171 (1965).
- (3) THOULESS, D. J. — *Nucl. Phys.*, **21**, 225 (1960).
- (4) VILLARS, F. — Proceedings of the International School of Physics «Enrico Fermi» — Course 23, 1961. Academic Press, New York, 1963.
- (5) FUKUDA, N., IWAMOTO, F., & SAWADA, K. — *Phys. Rev.*, **135**, A932 (1964).
- (6) THOULESS, D. J. — *Nucl. Phys.*, **22**, 78 (1961).

MÉCANISMES DE TRANSFERT À UN NUCLÉON (*)

R. DA SILVEIRA

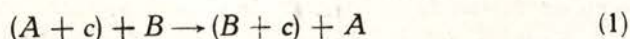
Institut de Physique Nucléaire — Division de Physique Théorique (***) — BP 1 — 91 Orsay

ABSTRACT — A theoretical approach of heavy ion transfer reactions is given using Glauber approximation.

RÉSUMÉ — On donne une formulation des réactions de transfert entre ions lourds en partant de l'approximation de Glauber.

INTRODUCTION

Le transfert d'un nucléon est le processus le plus fréquent parmi les réactions de réarrangement entre ions lourds. Nous le représentons schématiquement par :



où c est le nucléon initialement attaché au coeur A avec lequel il constitue le projectile $A' = A + c$ et qui, capturé par B , va constituer le noyau $B' = B + c$.

Après les premiers travaux de REYNOLDS, SCOTT & ZUCKER (1) et de CHACKETT & FREMLIN (2), le transfert d'un neutron ou d'un proton a fait l'objet de nombreuses expériences (3-16). L'accumulation aujourd'hui d'un grand nombre de résultats, tant aux énergies inférieures qu'aux énergies au-delà de la barrière de Coulomb, permet de se

(*) Exposé général présenté lors de la Session d'Études : « Sur la Physique et la Production des Ions Lourds », La Plagne, mars 1969.

(**) Laboratoire associé au C. N. R. S.

faire une idée de l'utilité d'un tel processus comme outil de travail en Physique Nucléaire.

On peut en particulier se demander dans quelle mesure à l'heure actuelle l'exploitation théorique de ces expériences est susceptible d'apporter des renseignements sur des sujets aussi importants que :

- a) La spectroscopie liée au nucléon transféré,
- b) Le mécanisme de réaction et la structure de la surface nucléaire.

La donnée en valeur absolue des distributions angulaires constitue le point de départ de l'étude des réactions de transfert. Ainsi, toute approche théorique du processus doit contenir simultanément a) et b) comme ingrédients fondamentaux. Toutefois, un traitement complet du problème étant à présent inexistant, il est intéressant de savoir quelles sont les données où les hypothèses sur a) et b), auxquelles les résultats expérimentaux sont particulièrement sensibles. Par exemple :

- 1) Peut-on déterminer par simple examen des distributions angulaires le moment angulaire transféré, ou encore,
- 2) Peut-on, à partir des distributions angulaires, tester les hypothèses émises sur le mécanisme de réaction sans pour autant traiter simultanément et exhaustivement le côté spectroscopique du problème ?

Pour tenter de répondre à ces questions, on examinera rapidement l'allure des résultats expérimentaux pour ensuite discuter les différentes méthodes d'approche du problème, en mettant l'accent sur le transfert bien au dessus de la barrière de Coulomb.

Pour ce qui est du transfert sous Coulombien, l'exposé sera très bref. Pour une vue d'ensemble de la situation théorique à ces énergies, on peut consulter les références (17) et (18), où l'on trouvera aussi une grande partie de la bibliographie originale.

1 — LE TRANSFERT SOUS LA BARRIÈRE DE COULOMB

En physique des ions lourds, il est d'usage courant de caractériser l'allure en fonction de l'énergie des distributions angulaires, pour la donnée du paramètre de Sommerfeld η . Z_1 et Z_2 étant les nombres de

charge du projectile et de la cible respectivement, m leur masse réduite et v leur vitesse relative à l'infini, η s'écrit :

$$\eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v}.$$

Lorsque les conditions expérimentales sont telles que η est très grand ($\eta \sim 30$) les distributions angulaires présentent une allure sans structure avec un maximum prononcé, aux grands angles. L'emplacement de ce maximum varie, pour une réaction donnée, systématiquement en fonction de l'énergie. Enfin, à la limite des très faibles énergies, l'emplacement de ce maximum tend vers π , les particules émergentes sont diffusées vers l'arrière. C'est le transfert au voisinage ou sous la barrière de Coulomb.

L'interprétation théorique de ces résultats est hautement facilitée par le fait que l'inégalité $\eta \gg 1$ traduit la condition que l'on doit satisfaire pour traiter en approximation classique (19) la diffusion dans un champ de Coulomb. BREIT & EBEL (20) ont les premiers utilisé cette approximation pour traiter les réactions de transfert par ions lourds.

Si l'on veut aborder le problème du point de vue quantique, on constate que les moyens d'approche restent très restreints. Il est donc naturel de voir étendre aux ions lourds (21-26) une méthode comme l'approximation de Born des ondes distordues (DWBA) qui s'était avérée utile dans l'étude de réactions mettant en jeu des projectiles beaucoup plus légers, tels que d , He^3 et α . Pour autant qu'il soit justifié d'appliquer aux ions lourds la DWBA, le fait qu'aux faibles énergies l'interaction de Coulomb domine la diffusion, permet de traiter sans ambiguïté les ondes distordues. Celles-ci sont alors, tout simplement, les ondes de Coulomb. Cette situation est à comparer à celle que l'on rencontre à grande énergie où la distortion provient alors en grande partie du potentiel nucléaire. Dans ce dernier cas, le nombre de paramètres dont on dispose est tel que l'on est en droit de se demander si un bon accord avec l'expérience est réellement significatif.

Si les distributions angulaires du transfert sous coulombien ne comportent pas de structure, cela signifie que le moment angulaire transféré n'y laisse pas de signature apparente. Toutefois, la possibilité de pouvoir attribuer aux sections efficaces calculées en DWBA une valeur absolue devrait permettre, d'une part, d'éliminer cet inconvénient, d'autre part, une détermination des facteurs spectroscopiques. On rencontre d'ailleurs une situation analogue dans la réaction de *stripping* du deuton aux énergies sous-coulombiennes (27).

2 — LE TRANSFERT AU-DESSUS DE LA BARRIÈRE DE COULOMB

Lorsqu'on dispose dans le système du centre de masse projectile-cible d'une énergie supérieure à la barrière de Coulomb, on constate que le maximum des distributions angulaires signalé plus haut s'accroît, tout en se déplaçant vers les petits angles de diffusion. Ensuite, l'énergie croissant, les courbes sans structure font place à une suite d'oscillations dont l'amplitude devient très faible aux grandes énergies.

Ce dernier aspect des résultats expérimentaux n'est pas encore très clair à l'heure actuelle. Il faut en effet un ensemble de données expérimentales très précises pour pouvoir localiser les maxima et les minima dans des oscillations de faible amplitude. D'autre part, l'amplitude des oscillations, à plus faible énergie, semblant déjà décroître aux grands angles, il serait intéressant de compléter les résultats en question par des données sur la diffusion vers l'avant. Dans le meilleur des cas B^{11} (N^{14} , C^{13}) C^{12} (14-b), $E_L = 113$ MeV les résultats expérimentaux ne descendent pas au dessous de 13° (CM).

L'existence d'oscillations dans les distributions angulaires fait de suite penser à un mécanisme où l'absorption joue un rôle fondamental. En effet, dès que les deux noyaux lourds en diffusion se trouvent séparés l'un de l'autre d'une distance avoisinant la somme de leurs rayons, un grand nombre de voies de réactions, autres que le transfert, deviennent possibles. Cette circonstance, alliée au fait que les fonctions d'onde d'état lié du nucléon transféré décroissent exponentiellement en dehors de la surface nucléaire, font des réactions de transfert un exemple typique des mécanismes de surface.

L'existence d'une structure dans les distributions angulaires laisse penser à une connexion simple entre celle-ci et le moment angulaire transféré au cours de la réaction. Toutefois cette connexion se présente pour le transfert d'un nucléon entre ions lourds avec plus d'ambiguïté que dans le cas du *stripping*, car dans cette réaction le projectile transfère à la cible la moitié de sa masse. Examinons la situation plus en détail dans le cas des ions lourds.

La réaction a lieu, grosso modo, comme il vient d'être dit, au contact des surfaces projectile-cible. C'est dire, dans un langage semi-classique, que les moments angulaires relatifs contribuant le plus se répartissent au voisinage de $L \sim kR$, où R est la somme des rayons des deux noyaux, et k le nombre d'ondes pour le mouvement relatif.

Dans le cas des ions lourds disposant dans leur centre de masse d'une énergie bien supérieure à la barrière de Coulomb, on atteint facilement de très grandes valeurs de L . Il faudrait alors des transferts de moment angulaire très élevés pour modifier sensiblement les conditions cinématiques initiales du mouvement relatif. Cette situation, alliée au fait que la masse transférée, un nucléon, est petite devant la masse des deux coeurs A et B (1) entre lesquels le transfert a lieu, a conduit différents auteurs — KAMMURI (28), KALINKIN & GRABOVSKI (29), STRUTINSKI (30) et FRAHN & VENTER (31) — à traiter le transfert comme un mécanisme quasi-élastique. Dans ces modèles, on fait abstraction du moment angulaire transféré, et l'on suppose le Q de la réaction petit devant l'énergie incidente. Le problème est alors traité comme une diffusion élastique pure, dont on ne conserve que les contributions provenant des collisions tangentielles. Pour ce faire, on part du développement en ondes partielles de l'amplitude de diffusion élastique :

$$f(\Theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) \eta_l e^{2i\sigma_l} P_l(\cos \Theta)$$

Les σ_l sont les déphasages coulombiens et les η_l sont paramétrisés de sorte à ne garder dans la somme que les termes au voisinage de $l \sim L = kR$.

Les modèles en question diffèrent entre eux par la forme particulière adoptée pour la paramétrisation des η_l . Ces différents traitements reproduisent correctement les distributions angulaires ne comportant pas de structure. Le succès de ces modèles, où toute description spectroscopique est absente, tient à la simplicité des résultats expérimentaux; la forme des sections efficaces différentielles traduisant surtout la diffusion mutuelle des deux coeurs lourds entre lesquels le transfert se fait.

Un traitement analytique beaucoup plus élaboré est le modèle de DAR (23, 24), qui prend comme point de départ la DWBA. L'hypothèse fondamentale du modèle se trouve dans le traitement analytique approché des ondes distordues $\Psi_j^{(\pm)}(\vec{k}_j, \vec{r}_j)$ dans les voies $j=i$ initiale et $j=f$ finale. Considérons le développement en ondes partielles des $\Psi_j^{(\pm)}$

$$\Psi_j^{(\pm)}(\vec{k}_j, \vec{r}_j) = 4\pi \sum_{lm} (-)^m i^l e^{\pm i\sigma_l} Y_{l,-m}(\hat{k}_j) Y_{l,m}(\hat{r}_j) \frac{F_l(k_j r_j)}{k_j r_j}$$

où les σ_l sont les déphasages coulombiens et les $F_l(k_j r_j)$ satisfont l'équation radiale contenant le potentiel optique total V_j (coulom-

bien + nucléaire) dans la voie j . Pour les grandes valeurs l , $l > kR$, la distortion provient uniquement du potentiel de Coulomb et l'on a

$$F_{l > kR} \longrightarrow \text{Onde de Coulomb pure}$$

Quant à l'effet de distortion du potentiel nucléaire, surtout important lorsque $l < kR$, il est introduit en multipliant chaque F_l par un coefficient η_l . Le rôle de ce coefficient est de rendre négligeable la contribution des $F_{l < kR}$ pour lesquels l'effet d'absorption du potentiel nucléaire est prépondérant.

Pour ce qui est de la description de l'état lié du nucléon transféré, Dar fait usage des méthodes développées par BUTTLE & GOLDFARB (25) pour le traitement en DWBA du transfert sous-coulombien. Nous reviendrons sur ce point par la suite.

En utilisant pour les ondes de Coulomb leur forme en approximation B. K. W., et pour les η_l la paramétrisation

$$\eta_l = \frac{1}{1 + e^{\frac{L_0 - l}{\delta}}}$$

où L_0 et δ sont liés à des paramètres ajustables, et en faisant appel aux techniques de calcul développées par Frahn et Venter, Dar obtient la section efficace différentielle sous forme analytique.

Ce modèle interprète d'une façon satisfaisante une variété importante de résultats expérimentaux où l'effet absorbant du potentiel nucléaire est présent.

3 — LE TRANSFERT AU-DESSUS DE LA BARRIÈRE DE COULOMB TRAITÉ EN APPROXIMATION DE GLAUBER

Nous allons exposer maintenant une formulation des réactions de transfert en utilisant la théorie de GLAUBER (32). Nous tâcherons par la même de retrouver dans le cadre de ce formalisme certaines hypothèses introduites de façon phénoménologique dans les modèles que nous venons d'examiner brièvement.

Compte tenu du schéma (1), l'hamiltonien du problème s'écrit :

$$\begin{aligned} H_i &= K_i + h_{A'} + V_{AB} + V_{Bc} \\ H_f &= K_f + h_{B'} + V_{AB} + V_{Ac} \end{aligned} \quad (2)$$

Nous négligerons la possibilité d'un transfert accompagné d'excitation du cœur et ignorerons la structure interne de A et B .

Dans (2), K_i et K_f sont les opérateurs, énergie cinétique dans la voie initiale et finale et V_{AB} , V_{Ac} et V_{Bc} les interactions $A-B$, $A-c$ et $B-c$ respectivement. Les hamiltoniens $h_{A'}$ et $h_{B'}$ décrivent les structures internes $A' = A + c$ et $B' = B + c$.

À l'aide des solutions stationnaires $\Phi_f^{(-)}$ et $\Psi_i^{(+)}$, qui satisfont, respectivement,

$$\begin{aligned} (H_f - V_{Ac} - E) \Phi_f^{(-)} &= 0 \\ (H_i - E) \Psi_i^{(+)} &= 0, \end{aligned}$$

on peut exprimer l'amplitude de transition T_{fi} par la relation de GOLDBERGER & WATSON (33)

$$T_{fi} = \langle \Phi_f^{(-)} | V_{Ac} | \Psi_i^{(+)} \rangle.$$

Nous allons restreindre cette analyse aux situations où :

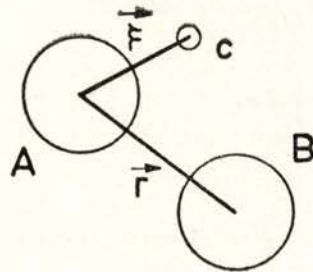
- 1) Les masses des « particules » A et B sont telles que

$$M_A, M_B \gg m_c$$

- 2) Le $|Q|$ de la réaction est petit devant l'énergie incidente. k_i et k_f étant les impulsions relatives initiale et finale, on a

$$|\vec{k}_i| \sim |\vec{k}_f| = |\vec{k}|, \quad v_i \sim v_f = v.$$

En vertu de 1), nous négligeons les effets de recul dus au transfert du nucléon c , ce qui revient à confondre les vecteurs reliant les centres de masse de noyaux A' et B et A et B' avec le vecteur $\vec{AB} = \vec{r}$.



Enfin nous utilisons pour $\Phi_f^{(-)}$ et $\Psi_i^{(+)}$ leurs expressions en approximation de Glauber, ce qui retirent, du point de vue formel, cette analyse aux petits angles de diffusion. Toutefois, la diffusion à grande énergie étant concentrée vers l'avant, la condition de petits angles ne doit pas constituer une restriction trop brutale.

Dans l'approximation en question, $\Phi_f^{(-)}$ et $\Psi_i^{(+)}$ s'écrivent

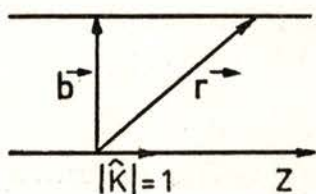
$$\langle \Phi_f^{(-)} | = \langle \Phi_{B'}(\vec{\xi} - \vec{r}) | e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r} - \frac{i}{\hbar v} \int_{z'}^{\infty} V_{AB}(r) dz''} \tag{3}$$

$$| \Psi_i^{(+)} \rangle = | \Phi_{A'}(\vec{\xi}) \rangle e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{z'} [V_{AB}(r) + V_{Bc}(\vec{\xi} - \vec{r})] dz'}$$

où $\Phi_{B'}(\vec{\xi} - \vec{r})$ et $\Phi_{A'}(\vec{\xi})$ sont des états propres des hamiltoniens $h_{B'}$ et $h_{A'}$. La direction des axes \vec{Z}' et \vec{Z}'' sont respectivement celles des vecteurs \vec{k} et \vec{k}' .

Aux petits angles de diffusion Θ , on peut confondre les axes \vec{Z}' et \vec{Z}'' avec une direction moyenne \vec{Z} (vecteur unité \hat{K}) faisant un angle $\Theta/2$ avec les vecteurs \vec{k} et \vec{k}' . Le produit des deux exponentielles dans (3) devient :

$$e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r} - \frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V_{AB}(r) dz - \frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^z V_{Bc}(\vec{\xi} - \vec{r}) dz}$$



Le moment transféré est $|\vec{q}| = |\vec{k}' - \vec{k}| \sim 2k \sin \Theta/2$ et le produit interne $\vec{q} \cdot \vec{r}$ devient :

$$\vec{q} \cdot \vec{r} = \vec{q} \cdot \vec{b} + \vec{q} \cdot \hat{K} z \sim \vec{q} \cdot \vec{b}$$

T_{fi} s'écrit alors

$$T_{fi} \sim \int d\vec{r} e^{i\vec{q} \cdot \vec{b} - \frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V_{AB}(r) dz} \langle \Phi_{B'} | V_{Ac} e^{-\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^z V_{Bc}(\vec{\xi} - \vec{r}) dz} | \Phi_{A'} \rangle \tag{4}$$

Pour pouvoir évaluer d'une façon approchée l'élément de matrice qui figure dans (4), nous allons donner un modèle de réaction.

Nous formulons ainsi l'hypothèse suivant laquelle l'interaction V_{Bc} ne donne de contribution significative au transfert que si l'on a simultanément :

i) Les centres de masse des noyaux A et B séparés de la distance

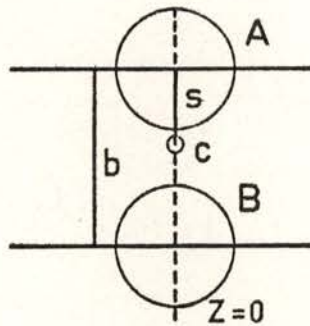
$$|\vec{r}|_{z=0} = b \quad . \quad b \gg R_A + R_B$$

b étant le paramètre d'impact de la trajectoire.

ii) Le nucléon c sur la ligne rejoignant les centres de masse des noyaux A et B .

\vec{r} et $\vec{\xi}$ ont pour coordonnées cylindriques

$$\begin{aligned} \vec{r} & (b, Z, \Phi) \\ \vec{\xi} & (s, z, \varphi) \end{aligned} \quad (4)$$



Compte tenu des hypothèses i) et ii) et de (4), la phase contenant l'interaction V_{Bc} devient

$$e^{-\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^z V_{Bc}(\vec{\xi} - \vec{r}) dz} = \begin{cases} e^{-\frac{i}{\hbar v} V_{Bc}(b-s)} & \text{si } Z \geq 0 \\ 1 \text{ ailleurs} & \end{cases} \begin{cases} z=0 \\ \varphi=\Phi \end{cases} \quad (5)$$

Si l'on pose $-\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V_{AB}(r) dz = \chi_{AB}(b)$ et $-\frac{1}{\hbar v} V_{Bc}(b-s) = \chi_{Bc}(b-s)$, T_{fi} s'écrit, compte tenu de (5),

$$T_{fi} \sim \int b db d\Phi e^{i\vec{q} \cdot \vec{b} + i\chi_{AB}(b)} \left\{ \int_{-\infty}^0 dZ \langle \Phi_{B'} | V_{Ac} | \Phi_{A'} \rangle + \int_0^{\infty} dZ \langle \Phi_{B'} | V_{Ac} e^{i\chi_{Bc}(b-s)} | \Phi_{A'} \rangle \right\}$$

L'élément de matrice $\langle \Phi_{B'} | V_{Ac} e^{i\lambda_{Bc}(b-s)} | \Phi_{A'} \rangle$ peut s'exprimer plus simplement si le potentiel V_{Bc} est parfaitement «absorbant», c'est-à-dire si :

$$e^{i\lambda_{Bc}(b-s)} = \begin{cases} 0 & \text{si } |b-s| < R_B \\ 1 & \text{ailleurs} \end{cases}, \quad b \gtrsim R_A + R_B$$

On a alors, compte tenu de (5),

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{B'} | V_{Ac} e^{i\lambda_{Bc}(b-s)} | \Phi_{A'} \rangle &\sim \langle \Phi_B | V_{Ac} | \Phi_{A'} \rangle - \\ &- \int_{b-R_B}^{\infty} s ds [\Phi_{B'} V_{Ac} \Phi_{A'}]_{\varphi=\Phi}^{z=0} \end{aligned}$$

La limite supérieure de l'intégrale sur s a été étendue à l'infini, vue que la portée de $V_{Ac}(\xi)$ est de l'ordre de R_A .

T_{fi} devient alors

$$\begin{aligned} T_{fi} \sim \int b db d\Phi e^{i\vec{q} \cdot \vec{b} + i\lambda_{AB}(b)} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dZ \langle \Phi_{B'} | V_{Ac} | \Phi_{A'} \rangle - \right. \\ \left. - \int_0^{\infty} dZ \int_{b-R_B}^{\infty} s ds [\Phi_{B'} V_{Ac} \Phi_{A'}]_{\varphi=\Phi}^{z=0} \right\} \quad (6) \end{aligned}$$

Lorsque la portée de V_{Ac} n'excède pas R_A et que la contribution à l'intégrale sur b de la région $b < R_A + R_B$ est négligeable, le deuxième terme à l'intérieur du crochet est petit devant le premier. Nous allons supposer que les conditions requises pour qu'il soit ainsi sont satisfaites, et nous allons porter notre attention sur le premier terme que, comme nous le verrons, est à lui seul capable d'interpréter d'une façon satisfaisante les distributions angulaires expérimentales.

L'absorption mutuelle (A, B) restreignant les contributions importantes à l'intégrale sur b aux régions $b \gtrsim R_A + R_B$ on peut utiliser pour $\Phi_{B'}(\vec{\xi} - \vec{r})$ sa forme asymptotique :

$$\Phi_{B'}(\vec{\xi} - \vec{r}) \sim N_2 h_{l_2}(i\beta |\vec{\xi} - \vec{r}|) Y_{l_2 \lambda_2}(\Omega) \quad (7)$$

où N_2 est une constante de normalisation, h_{l_2} une fonction de Hankel et β un paramètre lié à l'énergie de liaison ϵ de c dans B' par la relation :

$$\beta = (2m\epsilon\hbar^{-2})^{1/2}$$

Cette procédure est commune aux traitements de KAMMURI & NAKASIMA (22), ABELISHVILI (21), BUTLE & GOLDFARB (25) et DAR (18). Les variables $\vec{\xi}$ et \vec{r} peuvent être séparées dans (7) grâce à un théorème d'addition, BUTLE & GOLDFARB (25) et DANOS & MAXIMOM (34)

$$N_2 h_{l_2} (i\beta |\vec{\xi} - \vec{r}|) Y_{l_2 \lambda_2}(\Omega) = N_2 \sqrt{4\pi} \sum_{l' \lambda' \lambda''} (-)^{l_2(l_2+l-l')} \frac{\hat{l} \hat{l}_2}{\hat{l}} \cdot$$

$$(l\lambda, l_2 \lambda_2 | l' \lambda') (l_0, l_2 0 | l' 0) h_l(i\beta r) j_{l'}(i\beta \xi) Y_{l\lambda}^*(\hat{r}) Y_{l'\lambda'}(\hat{\xi}) \quad (8)$$

valable pour $r > \xi$. Comme l'on a $r \sim R_A + R_B$, les contributions où $r < \xi$ sont négligeables, en raison de la portée de V_{Ac} . Quant à l'état lié de c dans A' il est traduit par

$$\Phi_{A'}(\vec{\xi}) \sim u_{l_1}(\xi) Y_{l_1 \lambda_1}(\hat{\xi}). \quad (8')$$

Enfin notre objectif étant de tester les hypothèses du modèle pour ce qui est du mécanisme de réaction, nous allons concentrer notre attention sur la seule dépendance de l'angle de diffusion Θ , dans la section efficace différentielle.

Compte tenu de (8) et (8'), on a (25)

$$|T_{l_i}|^2 \sim \sum_l \left(j_1 \frac{1}{2}, l_0 | j_2 \frac{1}{2} \right)^2 \sum_{\lambda=-l}^l |T_{l\lambda}(\Theta)|^2$$

j_1, l_1 et j_2, l_2 étant les nombres quantiques de moment angulaire de c lié dans A' et B' respectivement.

Les valeurs possibles de l satisfont :

$$|l_1 - l_2| \leq l \leq |l_1 + l_2|$$

$$|j_1 - j_2| \leq l \leq |j_1 + j_2|$$

$(-)^{l_1+l_2} = (-)^l$, et $T_{l\lambda}(\Theta)$ est donné par

$$T_{l\lambda}(\Theta) = \int_0^\infty b db \int_{-\infty}^\infty dZ \int_0^{2\pi} d\Phi e^{iqb \cos \Phi + i\chi_{AB}(b)} h_l^*(i\beta r) Y_{l\lambda}^*(\Theta, \Phi)$$

La somme sur Φ est la représentation intégrale des fonctions de Bessel $J_\lambda(qb)$. Quant à l'intégrale sur Z , on peut l'évaluer d'une façon approchée.

$h_l^*(i\beta r)$ étant une fonction paire de Z :

$$h_l^*(i\beta\sqrt{b^2+Z^2}) \sim i^l \frac{e^{-\beta\sqrt{b^2+Z^2}}}{\beta\sqrt{b^2+Z^2}}$$

$$b \lesssim R_A + R_B$$

Seules les contributions $\lambda + l$ paires contribuent et, dans ce cas, les harmoniques sphériques variant lentement au voisinage de $Z=0$, on a grossièrement:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dZ \frac{e^{-\beta\sqrt{b^2+Z^2}}}{\sqrt{b^2+Z^2}} Y_{l\lambda}(\Theta, 0) \sim [Y_{l\lambda}(\Theta, 0)]_{z=0} 2 \int_0^{\infty} \frac{e^{-\beta\sqrt{b^2+Z^2}}}{\sqrt{b^2+Z^2}} dZ =$$

$$= Y_{l\lambda}\left(\frac{\pi}{2}, 0\right) K_0(\beta b) \quad l + \lambda \text{ pair}$$

$K_0(\beta b)$ est une fonction de Bessel du deuxième ordre. $T_{l\lambda}(\Theta)$ s'écrit finalement

$$T_{l\lambda}(\Theta) \sim \int_0^{\infty} b db e^{i\chi_{AB}(b)} J_\lambda(qb) K_0(\beta b) \quad (9)$$

avec

$$\chi_{AB}(b) = -\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} [V_{AB}^{(N)}(r) + V_{AB}^{(c)}(r)] dz \quad (10)$$

où $V_{AB}^{(N)}(r)$ est le potentiel optique nucléaire que nous traduisons par

$$V_{AB}^{(N)}(r) = -V_o v(r) - iW_o v(r) \quad (11)$$

On peut se faire rapidement une idée du comportement de $T_{l\lambda}(\Theta)$ et, par là même, justifier les hypothèses des différents modèles auxquels nous avons fait référence.

Si le « puits imaginaire » dans (11) est très profond, W_0 grand, $v(r)$ ayant une portée de l'ordre de $R_A + R_B$, $\exp [i \chi_{AB}^{(N)}(b)]$, où plus précisément $\text{Re} \{ \exp [i \chi_{AB}^{(N)}(b)] \}$ devient très petit dès que $b < R_A + R_B$ et tend vers l'unité lorsque $b \gtrsim R_A + R_B$.

Comme pour $b \gtrsim R_A + R_B$, $K_0(\beta b)$ se comporte comme $e^{-\beta b/\sqrt{b}}$, le produit

$$\text{Re} [e^{i \chi_{AB}^{(N)}(b)}] e^{-\beta b/\sqrt{b}} = \eta(b)$$

limite les contributions importantes à l'intégrale sur b dans (9) au voisinage de $b \sim R_A + R_B$, où $\eta(b)$ passe par un maximum.

Enfin si dans (9) on fait $l=0$ et que l'on remplace l'intégrale sur le paramètre d'impact b par une somme sur le moment angulaire L , avec la correspondance

$$k b \longleftrightarrow L + \frac{1}{2}$$

$$\eta\left(\frac{L + \frac{1}{2}}{k}\right) \longleftrightarrow \eta_L$$

on obtient, en suivant un canevas analogue à celui de Glauber :

$$T_{00}(\Theta) \sim \sum_L (2L + 1) \eta_L e^{2i\sigma_L} P_L(\cos \Theta)$$

η_L ayant un maximum au voisinage de $L \sim k(R_A + R_B)$. C'est le point de départ des différents modèles de KAMMURI (28), KALINKIN & GRABOWSKI (29), STRUTINSKI (30) et FRAHN & VENTER (31).

Revenons à l'expression (9) et tâchons de voir d'une façon qualitative comment le moment angulaire transféré est lié à la forme des distributions angulaires. Considérons alors une situation très simple où l'on néglige l'interaction de Coulomb, $\eta \ll 1$, et soit $V_{AB}^{(N)}(r)$ un potentiel à bord franc où $W_0 \rightarrow \infty$ (disque noir).

Comme pour les grandes valeurs de l'argument les fonctions de Bessel $K_x(\beta b)$ ne dépendent pas de leur ordre x , on a

$$K_0(\beta b) \sim K_\lambda(\beta b)$$

$$T_{l\lambda}(\Theta) \sim \int_{R=R_A+R_B}^{\infty} b db J_\lambda(qb) K_\lambda(\beta b) \underset{\Theta \ll \beta/k}{\sim} \frac{R}{\beta} J_\lambda(kR\Theta) K_{\lambda+l}(\beta R)$$

Cette expression a été obtenue par DAR (24) dans le cadre de son modèle.

Pour des ions lourds en diffusion très au-dessus de la barrière de Coulomb, on a $kR \gg 1$.

Les fonctions de Bessel J_λ acquièrent leur forme asymptotique dès les très petits angles si le moment angulaire transféré l n'est pas très élevé ($\lambda < kR\Theta$). Dans ces conditions, et en dehors des très petits angles, $\Theta \gg \frac{\lambda}{kR}$, toutes les distributions angulaires correspondant à un transfert de même parité ($l + \lambda$) se ressemblent.

4 — COMPARAISON AVEC QUELQUES RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX

Pour une comparaison avec l'expérience nous avons explicité les termes nucléaire et coulombien dans (11). Sachant le rôle fondamental joué dans le processus par l'absorption mutuelle des noyaux A et B , on n'a tenu compte que de la partie imaginaire du potentiel $V_{AB}^{(N)}(r)$ et, pour des raisons de simplicité, on a choisi pour $v(r)$ une gaussienne. Le potentiel optique total est donc

$$V_{AB}(r) = -iW_0 e^{-\alpha r^2} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$

et l'on a

$$T_{fi} \sim \int_0^\infty b db e^{-\frac{W_0 \sqrt{\pi}}{\hbar v \sqrt{\alpha}} e^{-\alpha b^2} + 2i\gamma \log b} K_0(\beta b) J_\lambda(qb) \quad (13)$$

On peut évaluer d'une façon approchée cette intégrale, en para-

métrisant (35) $e^{-\frac{W_0 \sqrt{\pi}}{\hbar v \sqrt{\alpha}} e^{-\alpha b^2}}$ à l'aide d'une expression du type $1 - \delta e^{-\delta' b^2}$ où δ et δ' sont des paramètres. Si l'on utilise alors pour $K_0(\beta b)$ et $J_\lambda(qb)$ leurs formes asymptotiques, on peut exprimer (12) en termes de fonctions de Weber. Mais ces fonctions ne sont pas de maniement aisé. L'expression (12) est une intégrale simple dont

l'exploitation avec un ordinateur est très facile et c'est cette voie que nous avons utilisée.

Pour tester les hypothèses de ce modèle, nous avons choisi des distributions angulaires expérimentales aux allures très différentes; les unes $B^{11}(N^{14}, C^{13})C^{12}$ et $B^{11}(N^{14}, O^{15})Be^{10}$ (14-b) (figs. 1 et 2) présentant des oscillations, les autres $(C^{12} + Ag)$ (15) et $(N^{14} + Ag)$ (16) (figs. 3 et 4) sans structure. L'accord avec l'expérience est obtenu par l'intermédiaire des deux paramètres W_0 et α .

Pour chacune des deux premières réactions, ces deux paramètres sont les mêmes aux différentes énergies sauf à 77 MeV pour $B^{11}(N^{14}, C^{13})C^{12}$ où une valeur de α plus élevée a dû être adoptée.

Pour les deux réactions en question, l'accord est, dans l'ensemble, satisfaisant. A 113 MeV et pour autant qu'il soit possible de définir des oscillations dans les résultats expérimentaux, celles-ci sont moins prononcées que ne le sont les prévisions théoriques. Cette extinction des oscillations est encore plus apparente à plus grande énergie (36). Cet effet apparaît en partie dans le cadre du modèle par l'intermédiaire de $v \sim \sqrt{E}$ dans

$$e^{-\frac{W_0 \sqrt{\pi}}{\hbar v \sqrt{\alpha}} e^{-\alpha b^2}}$$

Dans les courbes théoriques on constate effectivement une diminution dans l'amplitude des oscillations avec l'énergie.

D'autres raisons doivent toutefois être recherchées.

DAR & KOZLOWSKY (37) avancent deux hypothèses :

- a) Un mélange de configurations dans l'état du nucléon transféré ;
- b) Le transfert accompagné de l'excitation du coeur.

Chacune de ces deux situations peut conduire à des transferts de moment angulaire partiel, de parité différente. Ce mélange de parités donnerait lieu à la combinaison d'oscillations déphasées, dont le résultat serait une courbe où toute structure pourrait être éliminée.

DODD & GREIDER (38) invoquent, pour leur part, l'influence du recul dû au nucléon transféré, dont l'effet deviendrait non négligeable à grande énergie. Cette circonstance devrait conduire alors à des effets beaucoup plus sensibles lors du transfert d'un deuton ou d'une particule

alpha, et cela à plus faible énergie ⁽¹⁾. L'expérience (11, 13, 14-b) ne semble pas confirmer cette hypothèse.

Dans le cas de la réaction ($Ag + C^{13}$) (15) $E_C = 85$ MeV (figs. 3-a et 3-b), le résultat du calcul traduit bien l'allure des distributions angulaires.

Comme il s'agit partout du transfert d'un nucléon, le calcul a été fait dans tous les cas avec une même masse réduite moyenne et les mêmes valeurs de W_0 et α . La valeur absolue dans les courbes théoriques a été fixée de sorte à faire ressortir la variation de la position des maxima en fonction du paramètre η . Dans le cas où il y a transfert d'un proton, on a pris pour η sa valeur moyenne dans les deux voies de la réaction.

Pour la réaction ($Ag + N^{14}$) (16) $E_N = 113$ MeV le calcul a été mené de la même façon que pour ($Ag + C^{13}$), mais ici on remarque (figs. 4-a et 4-b) un désaccord très net aux petits angles, où l'on constate une forte remontée. Cette intensité vers l'avant, constatée déjà par KUMPF & DONETS (39) et KAUFMAN & WOLFGANG (6), ne semble pas pouvoir être attribuée à un mécanisme d'interaction directe conventionnel.

CONCLUSIONS

Le mécanisme des réactions de transfert est bien décrit là où l'on connaît bien l'interaction qui domine le processus de diffusion, c'est-à-dire aux énergies inférieures à la barrière de Coulomb. Cette circonstance fait certainement des réactions de transfert dans cette zone d'énergie un outil intéressant pour l'extraction de données spectroscopiques. Le traitement théorique prenant comme point de départ la DWBA, semble bien adapté à cette tâche.

Aux énergies supérieures à la barrière de Coulomb, nous avons vu qu'il était possible d'interpréter d'une façon satisfaisante les distributions angulaires expérimentales en termes d'un processus de surface. La forme des sections efficaces différentielles est surtout sensible à la description de la surface nucléaire. Cette description apparaît dans le formalisme exposé par la paramétrisation de la partie imaginaire du potentiel optique, responsable des effets d'absorption.

⁽¹⁾ Cette question est l'objet d'une nouvelle publication de Greider à paraître dans *Physical Review*.

En l'absence d'une théorie microscopique du potentiel optique, l'accord théorie-expérience obtenu par optimisation des paramètres ne donne, sur la description de la surface nucléaire, que des renseignements de caractère phénoménologique.

La détermination à partir des distributions angulaires du moment angulaire transféré n'est pas exempte de difficultés. L'accumulation de résultats expérimentaux devra permettre d'améliorer cette situation par une comparaison systématique avec les prévisions théoriques. Dans le même but, la donnée de la diffusion vers l'avant sera d'une aide certaine.

À très grande énergie, la disparition de la structure dans les distributions expérimentales semble montrer que le mécanisme du transfert devient sensible à des effets dont on ne tient pas compte convenablement dans les traitements théoriques actuels. Encore faut-il signaler que cette diminution dans la structure n'a été constatée qu'en dehors des petits angles. Nous avons vu que la diminution de la structure apparaissait naturellement, quoiqu'en partie seulement, dans le cadre de l'approximation de grande énergie de Glauber. D'autre part, nous examinons actuellement le comportement et la contribution du deuxième terme dans l'expression (6) négligé dans le stade actuel des calculs. Ce terme contribue différemment lorsque le même modèle (41) est appliqué à la diffusion élastique et inélastique, où le comportement diffractif des distributions angulaires est toujours présent à grande énergie.

Il reste toutefois que tant dans ce modèle que dans ceux discutés ici, ni l'effet dû au recul du nucléon transféré, ni celui dû à la différence d'énergie cinétique dans les deux voies de la réaction, ne sont présents.

Pour ce qui est du transfert à grande énergie, ce dernier effet est inclus dans des calculs en DWBA basés dans le formalisme de BUTLE & GOLDFARB) actuellement en cours (40). KAMMURI & YOSHIDA (26) ont pour leur part évalué la matrice T en DWBA sans aucune hypothèse restrictive. Les résultats de ce calcul, particulièrement long dans le cas des ions lourds, n'ont pas été testés avec des données expérimentales aux grandes énergies.

Enfin, dans le cas de la réaction ($N^{14} + Ag$) on a constaté un net désaccord aux petits angles. Ce désaccord est... encourageant car il signifie peut-être que les réactions de transfert par ions lourds sont susceptibles de mettre en évidence des mécanismes nouveaux.

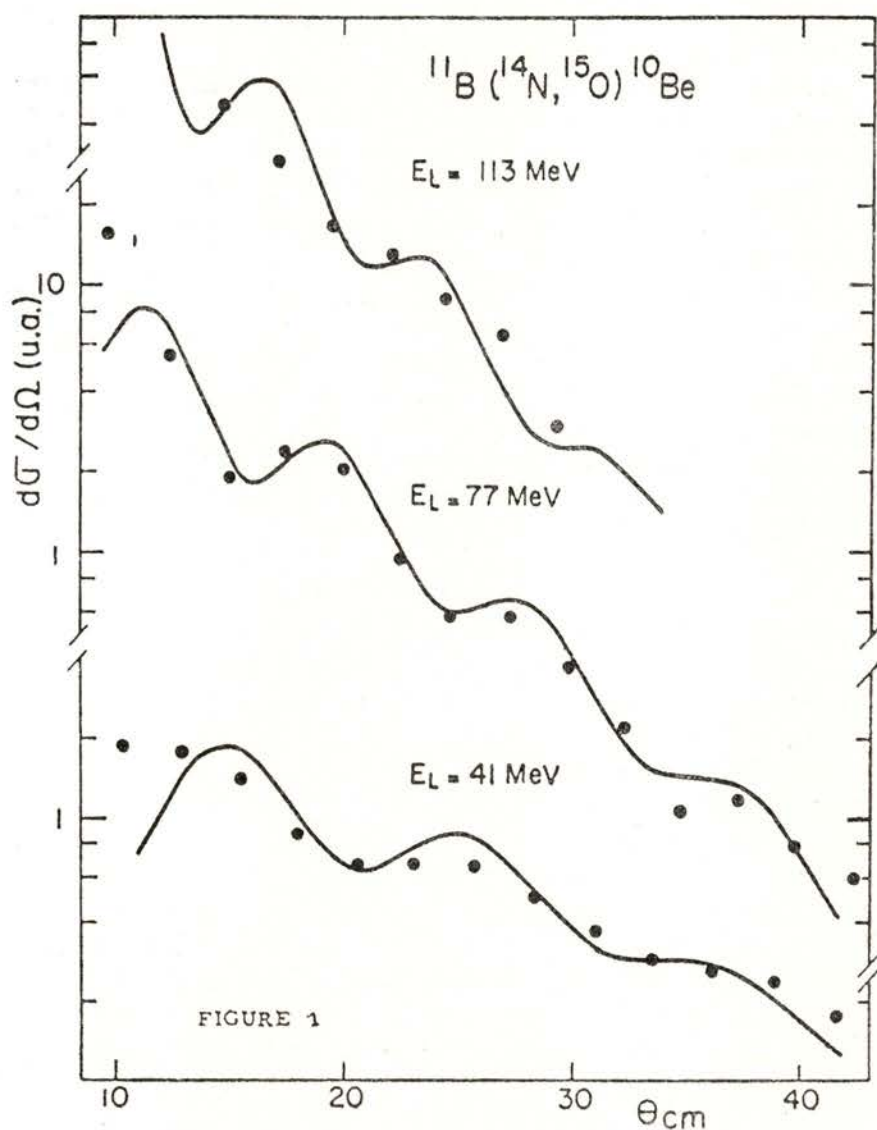


Fig. 1 — Distributions angulaires de la réaction $B^{11} (N^{14}, O^{15}) Be^{10}$ (14-b)
 $E_L = 41, 77$ et 113 MeV . $Q = -3,96 \text{ MeV}$.
 Les courbes sont le résultat du calcul avec $W_0 = 160 \text{ MeV}$, $\alpha = 0,0916 \text{ fm}^{-2}$.

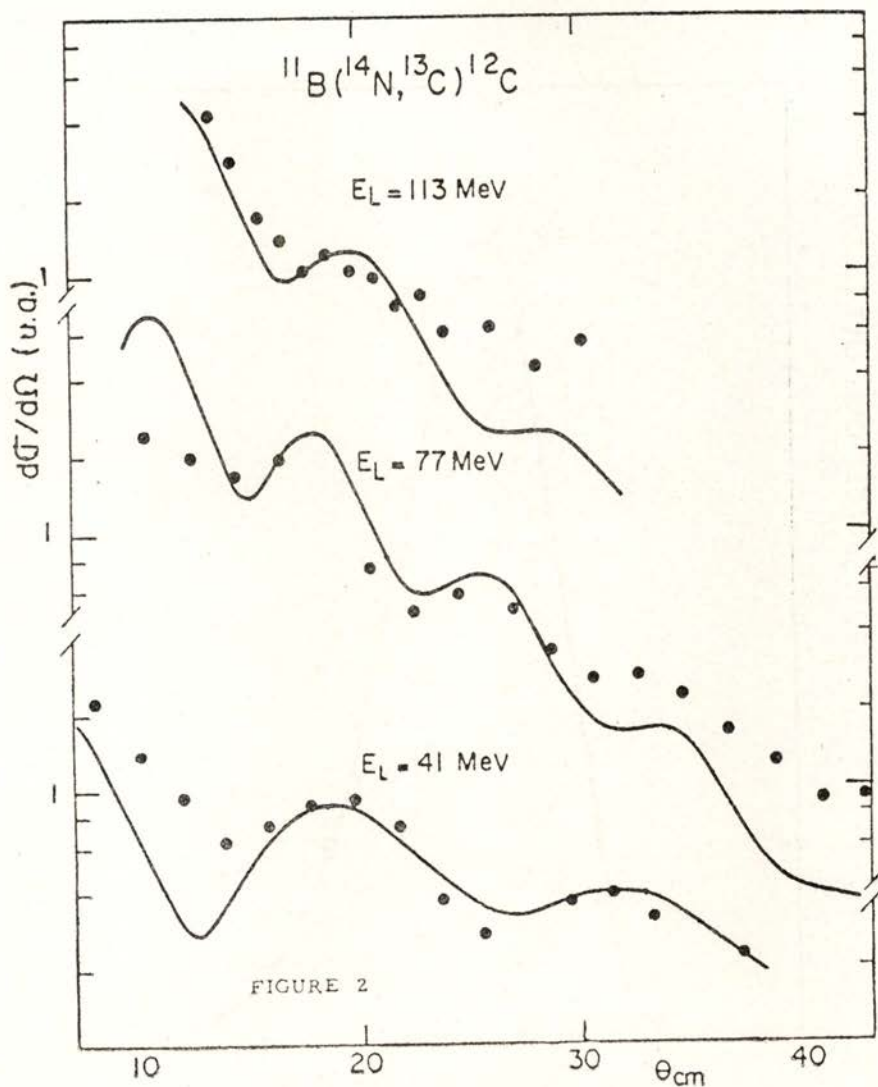


Fig. 2 — Distributions angulaires de la réaction $B^{11}(N^{14}, C^{13})C^{12}$ (14-b)
 $E_L = 41, 77$ et 113 MeV . $Q = 8,4 \text{ MeV}$.
 Les courbes sont le résultat du calcul avec $W_0 = 150 \text{ MeV}$, $\alpha = 0,119 \text{ fm}^{-2}$ pour $E_L = 41$ et 113 MeV .
 et $W_0 = 150 \text{ MeV}$, $\alpha = 0,0693 \text{ fm}^{-2}$ pour $E_L = 77 \text{ MeV}$.

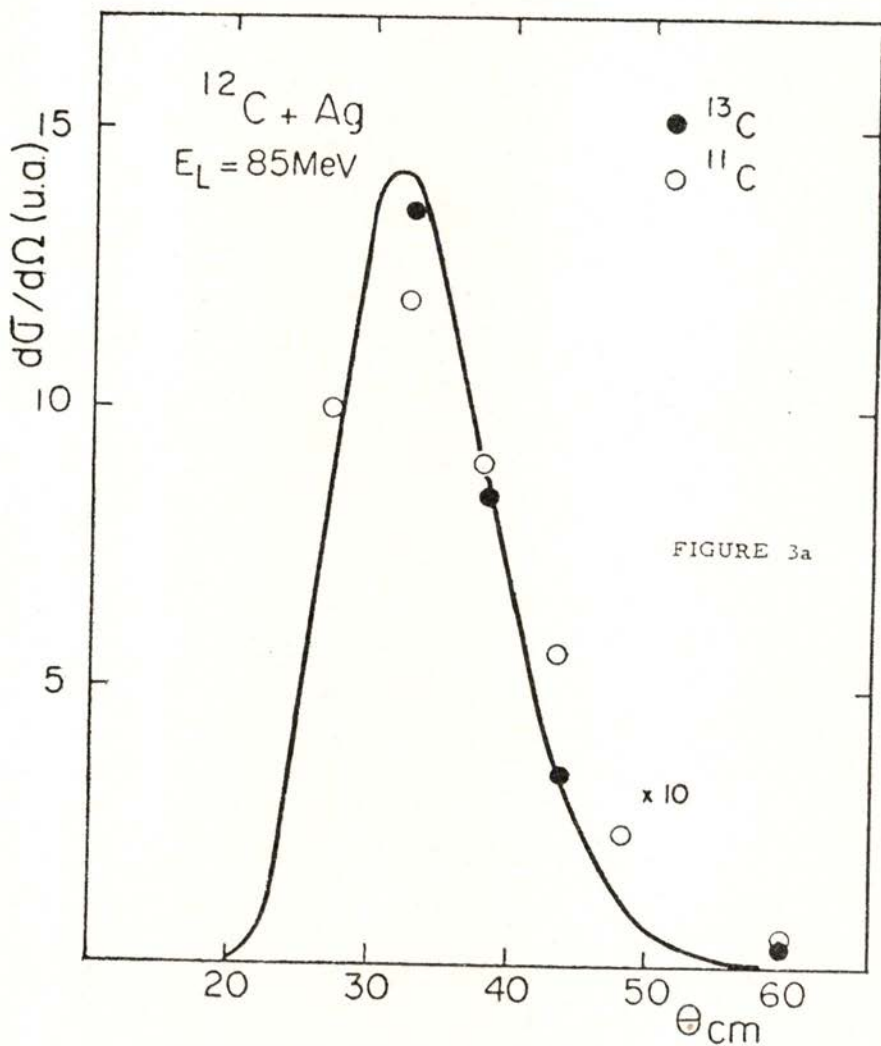


Fig. 3-a) Transfert d'un proton, C^{13} et C^{12}
 Les courbes sont le résultat du calcul avec
 $W_0 = 120 \text{ MeV}$, $\alpha = 0,0472 \text{ fm}^{-2}$

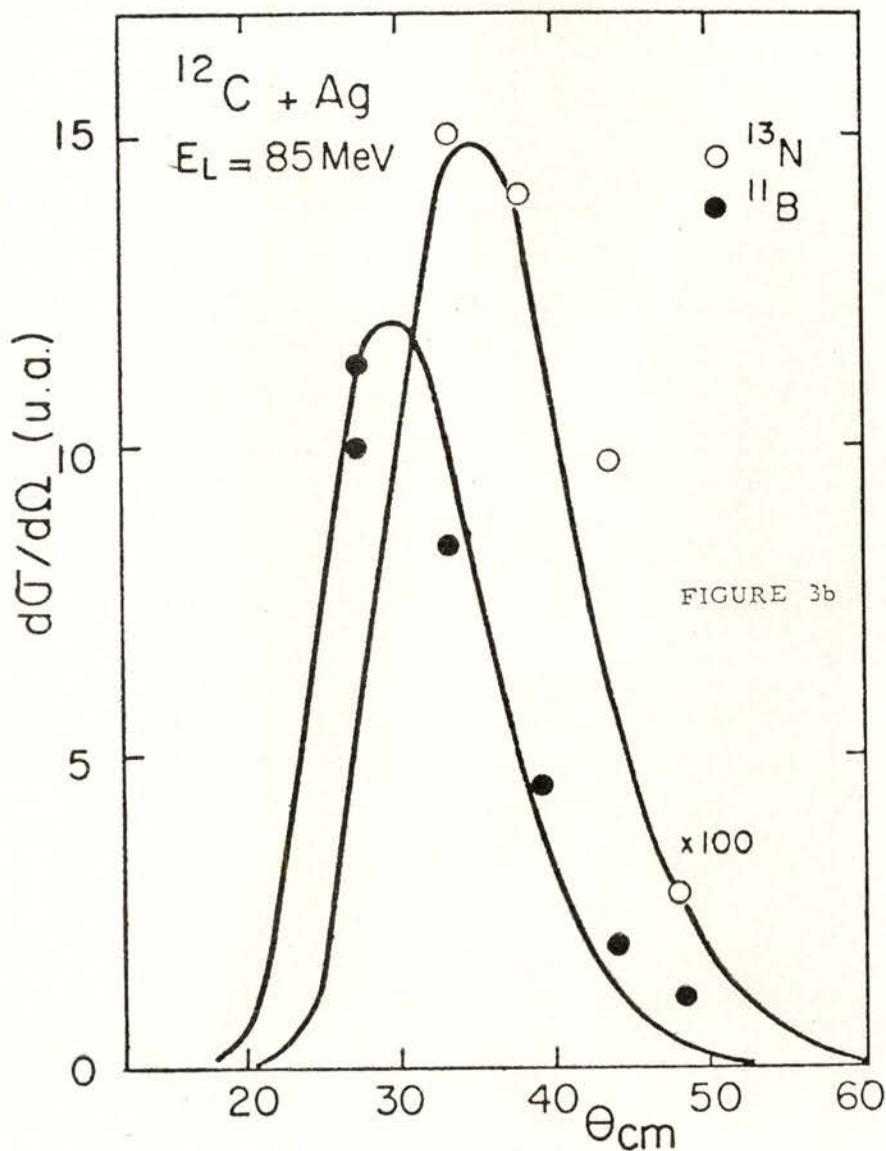


Fig. 3-b) Transfert d'un proton, B^{11} et N^{13}
 Les courbes sont le résultat du calcul avec
 $W_0 = 120 \text{ MeV}$, $\alpha = 0,0472 \text{ fm}^{-2}$

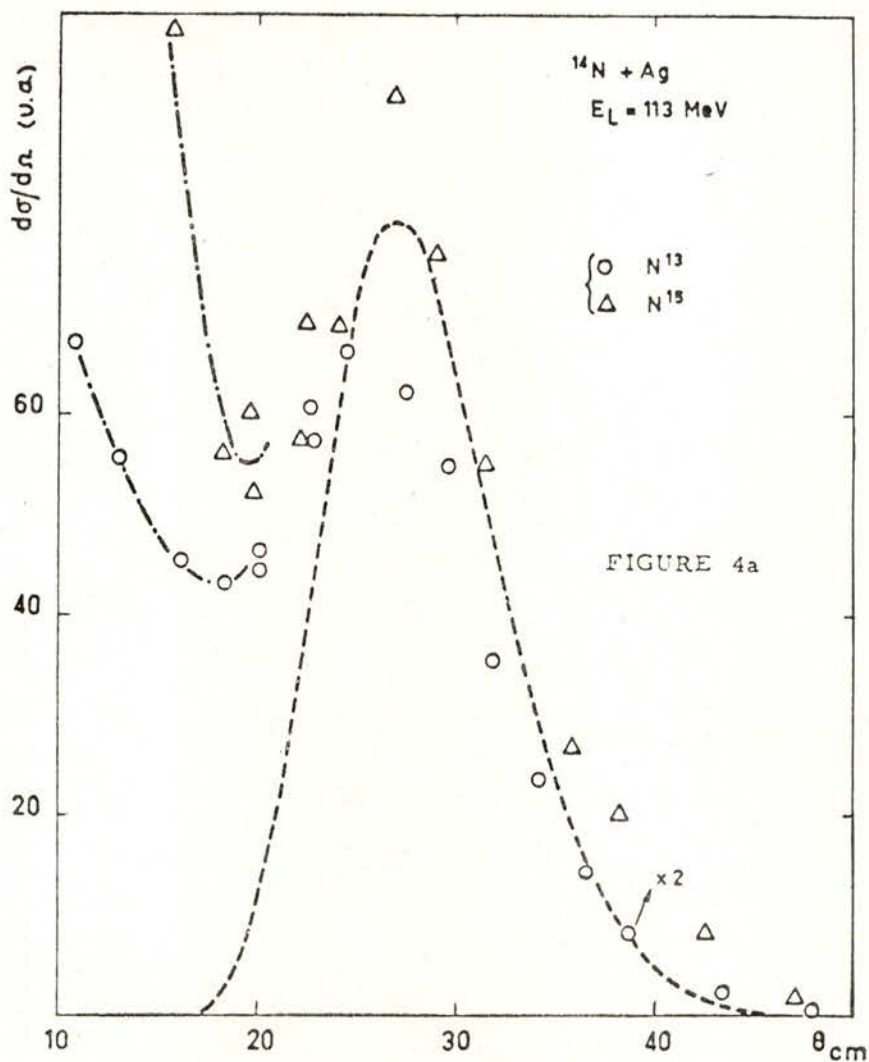


Fig. 4-a) Transfert d'un neutron, N^{13} et N^{15}
 Les courbes en tirets sont le résultat du calcul avec
 $W_0 = 140 \text{ MeV}$, $\alpha = 0,0416 \text{ fm}^{-2}$
 Les courbes en traits-points passant par les points expérimentaux sont seulement destinées à montrer l'amorce de la remontée vers l'avant.

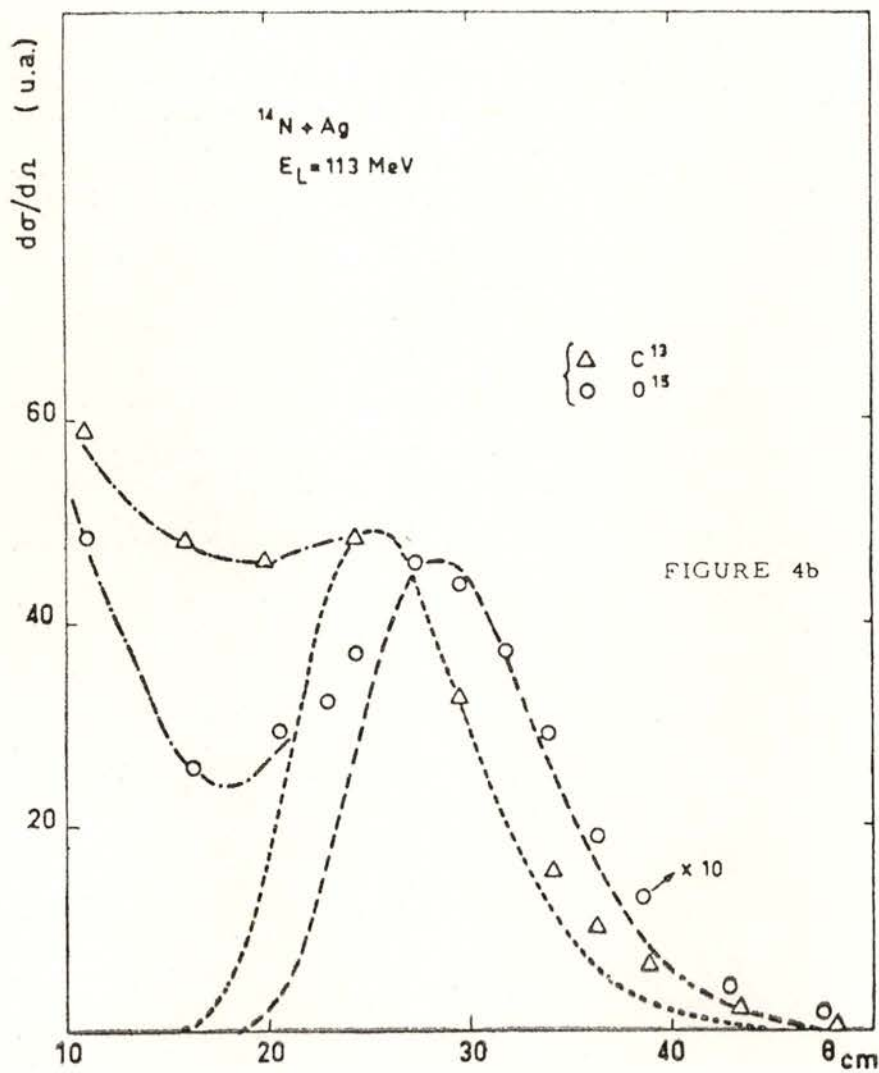


Fig. 4-b) Transfert d'un proton, C^{13} et O^{16}
 Les courbes en tirets sont le résultat du calcul
 avec
 $W_0 = 140 \text{ MeV}$, $\alpha = 0,0416 \text{ fm}^{-2}$
 Les courbes en traits-points passant par les
 points expérimentaux sont seulement destinées
 à montrer l'amorce de la remontée vers l'avant.

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier M. le Prof. M. Demeur pour les nombreux conseils dont il m'a fait profiter au cours de mon travail sur le transfert en approximation de Glauber, ainsi que Madame le Prof. Benoist-Gueutal pour d'utiles discussions.

Je tiens aussi à remercier MM. les Prof. M. Lefort et M. Riou pour la communication avant publication des résultats expérimentaux obtenus dans leurs groupes de recherche.

BIBLIOGRAPHIE

- (1) REYNOLDS, H. L., SCOTT, D. W. & ZUCKER, A. — *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S.*, 39, 975, 1953.
- (2) CHACKETT, K. F. et FREMLIN, J. H. — *Phil. Mag.*, 45, 735, 1954.
- (3) REYNOLDS, H. L. et ZUCKER, A. — *Phys. Rev.*, 101, 166, 1956.
- (4) HALBERT, M. L. et ZUCKER, A. — *Phys. Rev.*, 108, 336, 1957.
- (5) VOLKOV, V. V., PASINK A. S. et FLEROV, G. N. — *JETP Soviet Physics*, 6, 459, 1958.
- (6) KAUFMAN, R. et WOLFGANG, R. — *Phys. Rev. Lett.*, 3, 232, 1959.
- (7) TOTH, K. S. — *Phys. Rev.*, 121, 1190, 1961.
- (8) NEWMAN, E. — *Phys. Rev.*, 125, 600, 1962.
- (9) NEWMAN, E., TOTH, K. S. et ZUCKER, A. — *Phys. Rev.*, 132, 1720, 1963.
- (10) SACKS, M. V., CHASMAN, C. et BROMLEY, D. A. — *Phys. Rev.*, 139, B92, 1965.
- (11) BOCK, R., GROSSE-SCHULT M., VON OERTZEN, W. — *Phys. Lett.*, 22, 456, 1966.
- (12) VOLKOV, V. V. et WILCZYNSKI, J. — *Nucl. Phys.*, A92, 495, 1967.
- (13) VON OERTZEN, W., GUTBROD, H. H., MÜLLER, M., VOOS, U. et BUCK, R. — *Phys. Lett.*, 26B, 291, 1968.
- (14) a) VON OERTZEN, W., JACMART, J. C., LIU, M., PONGHEON, F., ROYNNETTE, J. C. et RIOU, M. — *Phys. Lett.*, 28B, 482, 1968, et b) — Cette réunion.
- (15) GALIN J., GATTY, B., LEFORT, M., PETER, J., TARRAGO, X. et BASILE, R. — *Phys. Rev.*, à paraître.
- (16) GALIN, J., GUERREAU, D., LEFORT, M., PETER, J., TARRAGO, X. et BASILE, R. — Cette réunion.
- (17) GREIDER, K. R. — *Advan. Theoret. Phys.* (Academic Press, N. Y. 1965) p. 291.
- (18) DAR, A. — Heidelberg Conf. on recent progress in Nuclear Physics with Tandems (Juillet 1966).
- (19) BOHR, N. — *D. K. D. V. S. Math. Fys. Medd.*, 18, n.° 8, 1948.
- (20) BREIT, G. et EBEL, M. E. — *Phys. Rev.*, 103, 679, 1956.
- (21) ABELISHVILLI, T. L. — *JETP Soviet Physics*, 13, 1010, 1963.
- (22) KAMMURI, T. et NAKASIMA, R. — Proc. Third Conf. on Reactions Between Complex Nuclei, ed. by Ghiorso, Diamond et Conzett (University of California) 1963, page 193.
- (23) DAR, A. — *Phys. Rev.*, 139, B1193, 1965.
- (24) DAR, A. — *Nucl. Phys.*, 82, 354, 1966.
- (25) BUTLE, P. J. A. et GOLDFARB, L. J. B. — *Nucl. Phys.*, 78, 409, 1966.

- (26) KAMMURI, T. et YOSHIDA, H. — OULNS 68-6 (OSAKA University).
- (27) DOST, M. et HERING, W. R. — *Phys. Rev. Lett.*, 26B, 443, 1968, et *Nucl. Phys.*, A111, 561, 1968.
- (28) KAMMURI, T. — *Prog. Theor. Phys.*, 28, 934, 1962.
- (29) KALINKIN, B. N. et GRABOWSKI, J. — reference 22, pág. 129.
- (30) STRUTINSKI, V. M. — *Soviet Physics JETP*, 19, 1401, 1964.
- (31) FRAHN, W. E. et VENTER, W. F. — *Nucl. Phys.*, 59, 651, 1964.
- (32) GLAUBER, R. J. — *Lectures in Theoretical Physics*, Boulder, vol. 1 (Interscience Publishers, N. Y., 1959).
- (33) GOLDBERGER, M. L. et WATSON, K. M. — *Collision Theory*, John Wiley and Sons, New York.
- (34) DANOS, M. et MAXIMON L. C. — *J. Math. Phys.*, 6, 766, 1965.
- (35) SQUIRES, E. J. — *Nucl. Phys.*, 6, 504, 1958.
- (36) BIRNBAUM, J., OVERLEY, J. C. et BROMELEY, D. A. — *Phys. Rev.*, 157, 787, 1967.
- (37) DAR, A. et KOSLOWSKY, B. — *Phys. Rev. Lett.*, 15, 1036, 1965.
- (38) DODD, L. R. et GREIDER, K. R. — *Phys. Rev. Lett.*, 14, 959, 1965.
- (39) KUMPF, H. et DONETS, E. D. — *JETP (Soviet Physics)*, 17, 539, 1963.
- (40) VON OERTZEN, W. — Cette réunion.
- (41) SILVEIRA, R. da — À paraître.

NOTE ON CORRELATION ENERGY OF THE ELECTRON GAS (*)

LÍDIA FERREIRA

ABSTRACT — An attempt has been made to describe the correlation structure of the electron gas in terms of the collective modes only. A very simple formalism is obtained which leads to very good agreement with the results of Nozières-Pines and Hubbard for low momentum transfer ($K/K_F < 1$), if one neglects the exchange terms.

The subject of this paper is a new interpretation of the electron gas correlation energy as the zero point energy of the collective degrees of freedom.

Our approach is extremely simple and leads to close agreement with the well known results of NOZIÈRES & PINES (1) and of HUBBARD (2).

We must conclude that our assumptions are meaningful at least as far as long wavelength modes are concerned.

Let us consider the operators

$$A_k^+ = N_k \sum_q C_{q+k}^+ C_q \quad (1)$$

(suggested by Pines work) where q is such that $|q| < k_F$, $|q+k| > k_F$ and C^+ , C are the fermion operators of the second quantization. C_{q+k}^+ is a creation operator which creates a particle of momentum $q+k$ and C_q is an annihilation operator that destroys a particle with momentum q .

The quantity N_k is determined by normalization. We obtain

$$N_k = \left[\frac{\Omega}{(2\pi)^3} k_F^3 \left(x - \frac{x^3}{12} \right) \right]^{-1/2} \quad (2)$$

where $x = k/k_F$ and k_F is the Fermi level momentum. Thus the operator A_k^+ when operating on the vacuum, $|\rangle$, yields a state of momentum k denoted by $|k\rangle$.

(*) This work was performed at the Centro de Estudos de Energia Nuclear, Instituto de Alta Cultura, annexed to Laboratório de Física, Universidade de Coimbra, Portugal.

The operators A_k^+ , A_k satisfy the following commutation rules

$$\begin{aligned} [A_k, A_{k'}^+] &= \delta_{kk'} \\ [A_k, A_{k'}] &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

We can justify these relations if we note, for instance, that

$$\langle | A_k^2 A_k^{+2} | \rangle \simeq 2 \quad (4)$$

(the equality is obtained by adding to the r. h. s. a quantity that is inversely proportional to the number of particles), and if we compute $\langle | [A_k^2, A_k^{+2}] | \rangle$ accepting (3) we obtain

$$\langle | A_k^2, A_k^{+2} | \rangle = 2 \quad (5)$$

Thus A_k and A_k^+ must be understood as boson operators. With the operators A_k and A_k^+ we can construct an hamiltonian which, up to terms quadratic in the boson operators, is equivalent to the exact hamiltonian

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i < j} v(r_{ij}) = T + V \quad (6)$$

The equivalent hamiltonian

$$H_{eq} = E_{HF} + \sum_k (e_k + g_k) A_k^+ A_k + \frac{1}{2} \sum_k g_k (A_k^+ A_{-k}^+ + A_{-k} A_k) \quad (7)$$

is constructed so that (6) and (7) have the same matrix elements, that is to say:

$$\begin{aligned} \langle | H_{eq} | \rangle &= \langle | H | \rangle = E_{HF} \\ \langle | A_k H_{eq} A_k^+ | \rangle &= \langle | A_k H A_k^+ | \rangle = E_{HF} + e_k + g_k \\ \langle | A_k A_{-k} H_{eq} | \rangle &= \langle | A_k A_{-k} H | \rangle = g_k \end{aligned} \quad (8)$$

E_{HF} is the Hartree Fock energy and

$$e_k = \langle | A_k T A_k^+ | \rangle = \frac{\left(\frac{4}{3} \frac{k_F^2}{2m} x \right)}{\left(1 - \frac{x^2}{12} \right)} \quad (9)$$

The matrix element g_k has been computed neglecting the exchange term and the Hartree Fock self consistent potential and with $v(r_{ij}) = \frac{e^2}{r_{ij}}$

$$g_k = \langle | A_k V A_k^+ | \rangle = \frac{\alpha r_s}{\pi m} k_F^2 \frac{1}{x} \left(1 - \frac{x^2}{12} \right) \quad (10)$$

where $me^2/k_F = \alpha r_s$ and $\alpha = (4\pi/9)^{1/3}$.

The quantities (2) (9) and (10) are the results for $x < 2$. When $x > 2$ we obtain

$$N_k = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_F^3 \quad (11)$$

$$e_k = \frac{k_p^2}{2m} x^2 \quad (12)$$

$$g_k = \frac{4}{3} \frac{\alpha r_s}{\pi m} k_F^2 \frac{1}{x^2} \quad (13)$$

The hamiltonian H_{eq} can be diagonalized by the transformation

$$\begin{aligned} B_k^+ &= x_k A_k^+ - y_k A_{-k} \\ B_k &= x_k A_k - y_k A_{-k}^+ \end{aligned} \quad (14)$$

where x_k and y_k are real quantities, such that $x_k^2 - y_k^2 = 1$, which is the condition for the operators B_k, B_k^+ to obey boson commutations relations.

We denote the diagonalized hamiltonian by

$$H = E_{HF} + E_c + \sum_k w_k B_k^+ B_k \quad (15)$$

The equations of motion $[B_k^+, H] = w_k B_k^+, [B_k, H] = -w_k B_k$ give

$$w_k = [e_k(e_k + 2g_k)]^{1/2} \quad (16)$$

$$E_c = \frac{1}{2} \sum_k (w_k - e_k - g_k) \quad (17)$$

We can convert the amount (17) to an integration over the interval $(0, \infty)$

$$E_c = \frac{1}{(\alpha r_s)^2} \frac{3}{4} \int_0^\infty x^2 (w_k(x) - e_k(x) - g_k(x)) dx \quad (18)$$

In fig. 1 we plot the integrand. We notice that our result are between Nozières-Pines and Hubbard results.

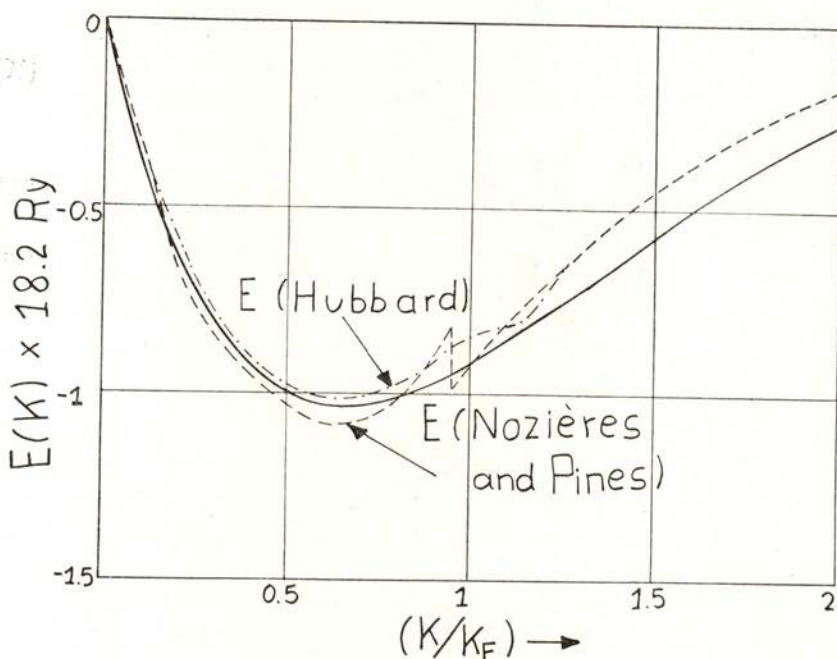


Fig. 1

The correlation energy may be considered as a sum of contributions from each value of k . For k such that $k/k_F < 1$ the collective modes described by the operators A_k, A_k^+ are responsible for nearly all the correlation energy.

The author is very grateful to Prof. J. da Providência for the orientation of this work.

REFERENCES

- (1) NOZIÈRES, P., & PINES, D.—*Phys. Rev.*, 111, 442, 1958.
- (2) HUBBARD, J.—*Proc. Roy. Soc. (London)*, A243.



Toute la correspondance concernant la rédaction de PORTUGALIAE PHYSICA doit être adressée à

PORTUGALIAE PHYSICA
Laboratório de Física da Faculdade de Ciências
LISBOA - 2 (Portugal)

Prix de l'abonnement:	250 escudos (US \$8.50) par volume
Prix des volumes déjà parus:	300 escudos (US \$10)
Prix du fascicule:	75 escudos (US \$2.50)

Les membres de la «Sociedade Portuguesa de Química e Física» ont une réduction de 50 % sur les prix indiqués.

Les Universités, les Laboratoires de Physique, les Académies, les Sociétés Scientifiques et les Revues de Physique sont invités à recevoir cette revue en échange de leurs publications.

PORTUGALIAE PHYSICA donnera un compte-rendu détaillé de tous les ouvrages soumis à la rédaction en deux exemplaires.

All mail concerning PORTUGALIAE PHYSICA to be addressed to:

PORTUGALIAE PHYSICA
Laboratório de Física da Faculdade de Ciências
LISBOA - 2 (Portugal)

Subscription rates:	250 escudos (US \$8.50) per volume
Price of past volumes:	300 escudos (US \$10)
Price of copy:	75 escudos (US \$2.50)

Members of the «Sociedade Portuguesa de Química e Física» may obtain *Portugaliae Physica* at a reduced price (50 %).

Universities, Physics Laboratories, Academies, Scientific Societies and Physics Publications are invited to receive this review in exchange for their publications.

PORTUGALIAE PHYSICA will give a detailed report of any book if two copies have been submitted.



PORTUGALIAE PHYSICA

VOLUME 5
FASCÍCULO 4
1969-1970

INSTITUTO DE ALTA CULTURA
CENTROS DE ESTUDOS DE FÍSICA DAS UNIVERSIDADES PORTUGUESAS

PORTUGALIAE PHYSICA

Fundadores: A. Cyrillo Soares, M. Telles Antunes, A. Marques da Silva, M. Valadares.

VOLUME 5

1969

Fascículo 4

VOLUMES PUBLICADOS:

Vol. 1 — 1943-45 — 326 pp.

Vol. 2 — 1946-47 — 256 pp.

Vol. 3 — 1949-54 — 173 pp.

Vol. 4 — 1965-66 — 304 pp.

Vol. 5 — 1967-70 — 194 pp.

Redacção: Laboratório de Física da Faculdade de Ciências — Lisboa-2
(PORTUGAL)

Comissão de redacção:

J. Moreira de Araújo — Carlos Braga
— Carlos Cacho — A. Pires de Car-
valho — M. Abreu Faro — J. Gomes
Ferreira — F. Bragança Gil — Manuel
Laranjeira.

Amaro Monteiro — J. Pinto Peixoto
— J. da Providência — Lídia Sal-
gueiro — J. de Almeida Santos — José
Sarmiento — António da Silveira —
J. Veiga Simão.

Í N D I C E

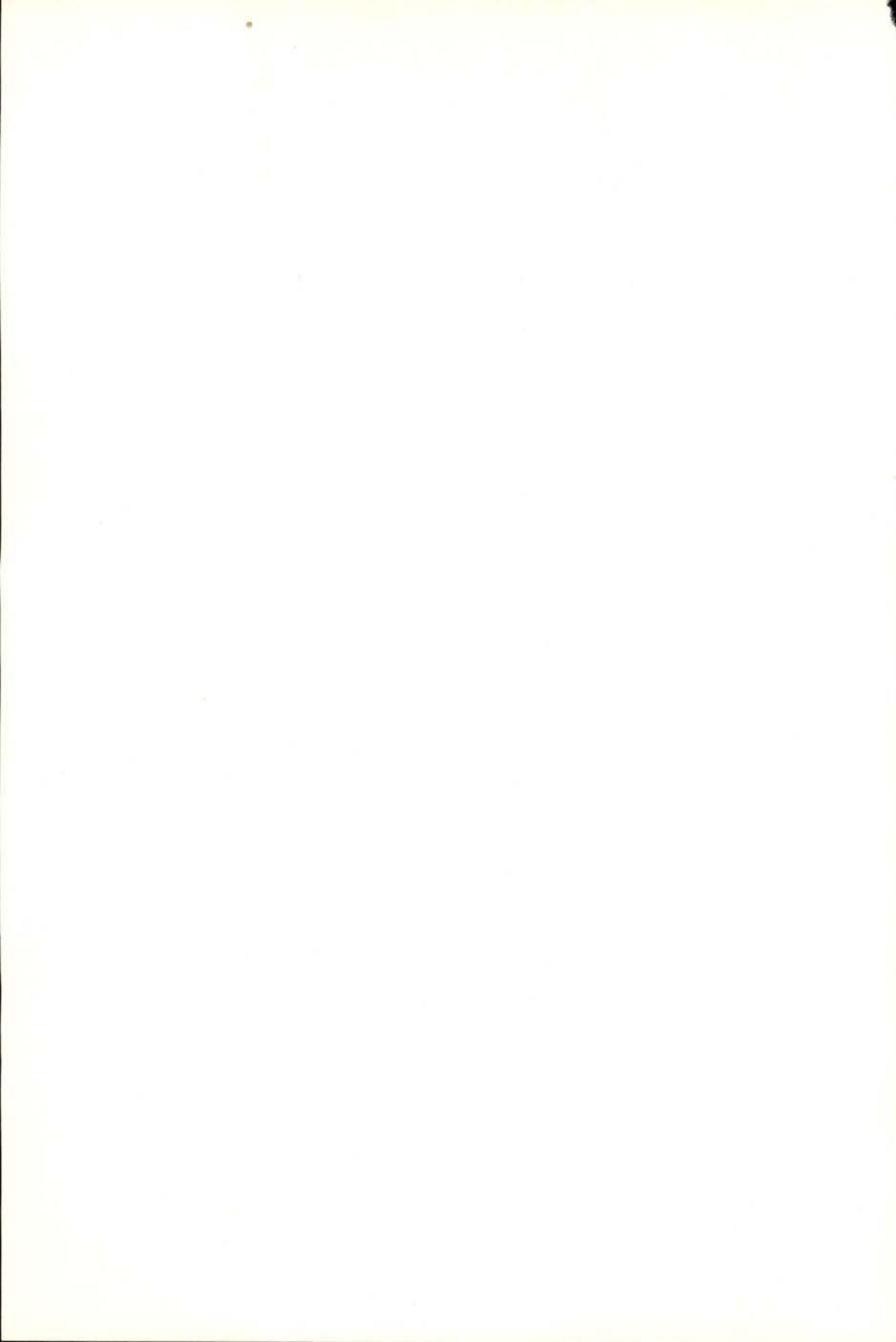
(Table des matières)

<i>A simplified version of the random-phase approximation and the problem of the correlation energy of a many-fermion system, by J. da PROVIDÊNCIA</i>	125
<i>Stationary states with minimum entropy production and non constant phenomenological coefficients, by J. J. DELGADO DOMINGOS</i>	139
<i>Les résonances en physique des hautes énergies, par R. NATAF</i>	145
<i>Liste des publications reçues actuellement en échange avec Portugaliae Physica</i>	189
<i>Instructions pour les auteurs</i>	193

CDU 53 (469) (05)

PORTUGALIAE PHYSICA

VOLUME 5
FASCÍCULO 4
1969 - 1970



A SIMPLIFIED VERSION OF THE RANDOM-PHASE APPROXIMATION AND THE PROBLEM OF THE CORRELATION ENERGY OF A MANY-FERMION SYSTEM (*)

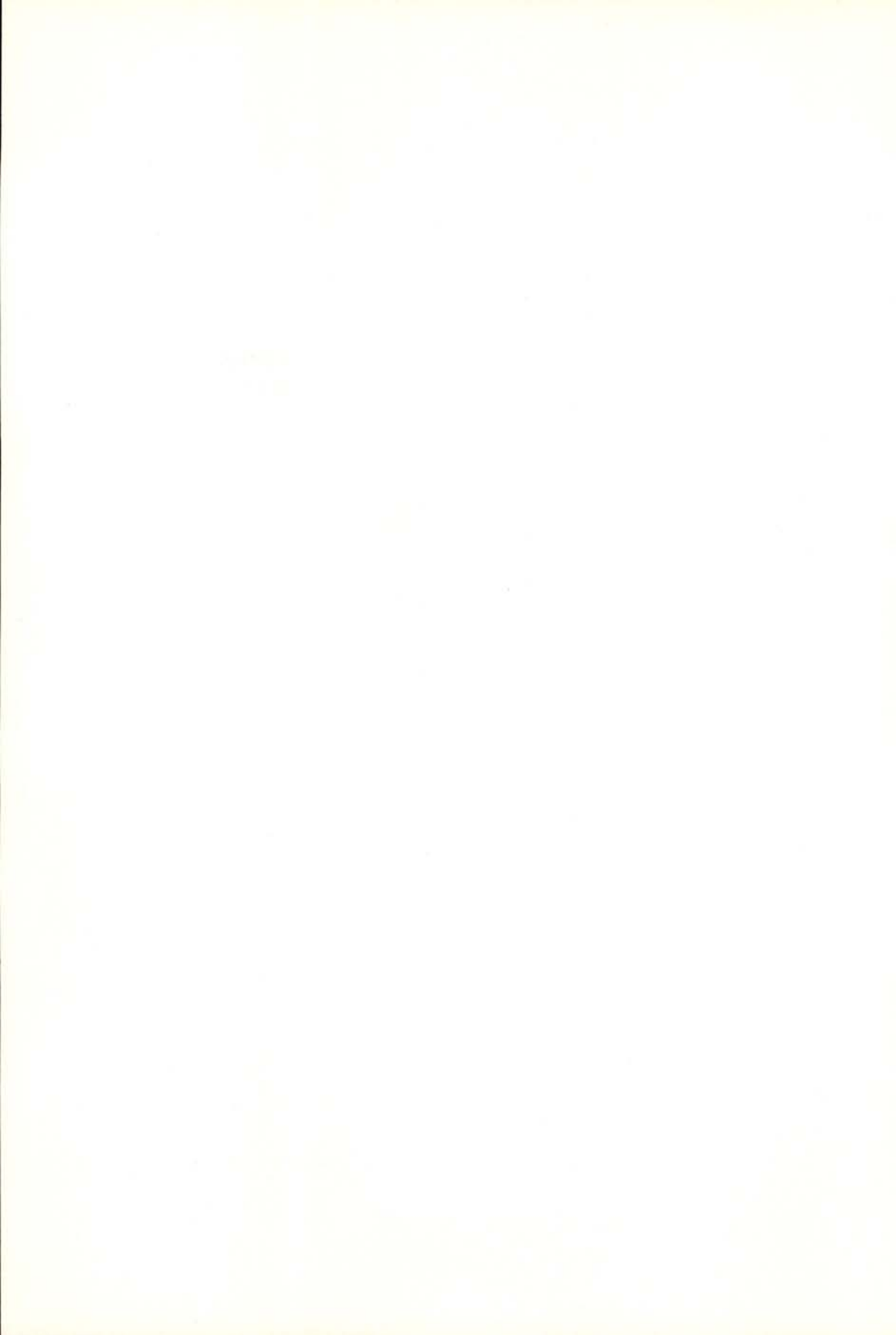
J. DA PROVIDÊNCIA

Laboratório de Física, Universidade, Coimbra, Portugal

ABSTRACT — A discrepancy between the formula for the correlation energy of a many-fermion system derived by the conventional random phase approximation (RPA) method and the corresponding expression derived by summation of perturbation theory bubble diagrams is investigated.

It is shown that this discrepancy is absent from a simplified version of the RPA dealing only with collective excitations. As an example, the new version of the RPA is applied, with good results, to the electron gas.

(*) Based on a lecture given at the Seminar on Physical Theories and Nuclear Physics, Instituto de Alta Cultura, Lisbon.



1 — INTRODUCTION

In this article we will develop some ideas which we have already presented, in a condensed form, in a previous publications (1). A more detailed account of the results of ref. 1 will also be given here. We discuss a type of discrepancy which may appear in calculations of correlation effects based on the random phase approximation (RPA). It is well known that an expression for the correlation energy of a many-fermion system arises naturally in the diagonalization of an effective boson hamiltonian obtained by the procedure which we now describe. Let

$$H = \sum_{ij} k_{i,j} c_i^+ c_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} v_{ij,kl} c_i^+ c_j^+ c_l c_k, \quad (1.1)$$

be the hamiltonian of some system. The c_i^+ , c_j are fermion operators. We denote by the letters a, b, c, \dots occupied single particle states in the Hartree-Fock ground state $|O\rangle$ of our system and we denote by m, n, p, \dots non-occupied single particle states. A standard procedure (2) for arriving at the RPA is to replace pairs of fermion operators $c_a^+ c_m$ by true boson operators B_{ma} ,

$$\begin{aligned} c_a^+ c_m &\rightarrow B_{ma}, \\ [B_{ma}, B_{nb}] &= 0, \quad [B_{ma}, B_{nb}^+] = \delta_{mn} \delta_{ab}. \end{aligned} \quad (1.2)$$

One then replaces the Hartree-Fock state $|O\rangle$ by the boson vacuum $|O\rangle$ and finally one replaces the hamiltonian H by a new hamiltonian H_B , quadratic in the boson operators, which one requires to be equivalent to H in the sense that

$$\begin{aligned} \langle O | H c_m^+ c_a | O \rangle &= \langle O | H_B B_{ma}^+ | O \rangle, \\ \langle O | c_b^+ c_n H c_m^+ c_a | O \rangle &= \langle O | B_{nb} H_B B_{ma}^+ | O \rangle, \\ \langle O | H c_n^+ c_b c_m^+ c_a | O \rangle &= \langle O | H_B B_{nb}^+ B_{ma}^+ | O \rangle. \end{aligned} \quad (1.3)$$

We then have (2)

$$\begin{aligned}
 H_B = E_{HF} + \sum (\varepsilon_m - \varepsilon_a) B_{ma}^+ B_{ma} \\
 + \sum (v_{an, mb} - v_{an, bm}) B_{nb}^+ B_{ma} \\
 + \frac{1}{2} \sum (v_{ab, mn} - v_{ab, nm}) B_{nb} B_{ma} \\
 + \frac{1}{2} \sum (v_{mn, ab} - v_{mn, ba}) B_{nb}^+ B_{ma}^+
 \end{aligned} \quad (1.4)$$

where the ε_i are Hartree-Fock single particle energies,

$$k_{i,j} + \sum_a (v_{ia, ja} - v_{ia, aj}) = \varepsilon_i \delta_{ij}, \quad (1.5)$$

and E_{HF} is the Hartree-Fock ground state energy. The new hamiltonian can be diagonalized by a canonical transformation

$$\begin{aligned}
 \theta_r^+ = \sum_{ma} (X_{ma}^{(r)} B_{ma}^+ + Y_{ma}^{(r)} B_{ma}) \\
 [\theta_r, \theta_s] = 0, \quad [\theta_r, \theta_s^+] = \delta_{rs}.
 \end{aligned} \quad (1.6)$$

Indeed, H_B attains the form

$$H_B = E_{HF} + E_c + \sum_r \omega_r \theta_r^+ \theta_r, \quad (1.7)$$

provided the amplitudes $X_{ma}^{(r)}$, $Y_{ma}^{(r)}$ satisfy the eigenvalue equations

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon_m - \varepsilon_a) X_{ma}^{(r)} + \sum_{nb} [(v_{mb, an} - v_{mb, na}) X_{nb}^{(r)} \\
 - (v_{mn, ab} - v_{mn, ba}) Y_{nb}^{(r)}] = \omega_r X_{ma}^{(r)} \\
 (\varepsilon_m - \varepsilon_a) Y_{ma}^{(r)} + \sum_{nb} [(v_{an, mb} - v_{an, bm}) Y_{nb}^{(r)} \\
 - (v_{ab, mn} - v_{ab, nm}) X_{nb}^{(r)}] = -\omega_r Y_{ma}^{(r)}.
 \end{aligned} \quad (1.8)$$

The quantities ω_r are excitation energies and E_c is the correlation energy. As a by product of the diagonalization of H_B one obtains the following expression for E_c

$$E_c = \frac{1}{2} \sum_r \omega_r - \frac{1}{2} \sum_{ma} (\varepsilon_m - \varepsilon_a + v_{am, ma} - v_{am, am}). \quad (1.9)$$

Now this equation overestimates, by an amount equal to the second order energy, the correlation energy obtained by summing the so called bubble diagrams. Indeed, the perturbation theory result is (3)

$$\begin{aligned}
 E_{c,PT} = & \frac{1}{2} \sum_r \omega_r - \frac{1}{2} \sum_{ma} (\varepsilon_m - \varepsilon_a + v_{am,ma} - v_{am,am}) \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{abmn} \frac{v_{ab,mn} (v_{mn,ab} - v_{mn,ba})}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_m - \varepsilon_n}.
 \end{aligned}
 \tag{1.10}$$

We wish to investigate the discrepancy between eqs. (1.9) and (1.10). This discrepancy shows the RPA derivation of the correlation energy to be unsatisfactory. We must conclude therefore that some of the RPA assumptions are violated, i.e., some of the quantities

$$\sum_r (X_{ma}^{(r)*} c_a^\dagger c_m + Y_{ma}^{(r)*} c_m^\dagger c_a)$$

must fail to behave as boson operators. It has been conjectured that this discrepancy could be remedied by discarding the non-collective RPA modes (4) since one expects only the collective modes to behave as bosons. Then eq. (1.7) may be replaced by

$$H = H_{int} + \sum_r \omega_r \theta_r^\dagger \theta_r,
 \tag{1.11}$$

where the summation extends only over collective modes and H_{int} is intrinsic in the sense that it commutes with collective operators θ_r . The expectation values of H_{int} already includes the contribution of the zero-point fluctuations of the collective modes to the correlation energy. One expects that correlation effects associated with the intrinsic degrees of freedom may be taken care of by low order perturbation theory, if necessary.

2. A VERSION OF THE RPA RESTRICTED TO COLLECTIVE EXCITATIONS

If we apply eq. (1.9) to the electron gas we obtain a divergent result. The divergency is removed by using eq. (1.10) instead of eq. (1.9). Since the discrepancy between the two equations is infinite for the electron gas, this system may be used as a convenient example to investigate the source of that discrepancy.

We develop now a version of the RPA dealing only with the collective degrees of freedom having mainly in mind the electron gas. The method may be easily extended to other systems and should be free of the inconsistency of the conventional RPA under investigation. A restricted RPA calculation dealing only with the collective degrees of freedom has already been advocated by Holtzwarth (5) on different grounds.

The electron gas hamiltonian may be written

$$H = \sum_{\mathbf{k}, s} (\mathbf{k}^2 / 2m) c_{\mathbf{k}, s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, s} + \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', s, s'} (2\pi e^2 / q^2) \times c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}' - \mathbf{q}, s'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}', s'} c_{\mathbf{k}, s} \quad (2.1)$$

where $c_{\mathbf{k}, s}$ is the annihilation operator for an electron of momentum \mathbf{k} and spin s . Let us consider the following operators, which we will use to create excited states,

$$A_{\mathbf{q}; s, s'}^{\dagger} = N_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k} < k_F, |\mathbf{k} + \mathbf{q}| > k_F} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, s'} \quad (2.2)$$

where the normalization factor $N_{\mathbf{q}}$ is determined by the condition

$$\langle O | A_{\mathbf{q}; s, s'} A_{\mathbf{q}; s, s'}^{\dagger} | O \rangle = 1 \quad (2.3)$$

These operators are obviously related to the density operators

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{i=1}^N \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i) \quad (2.4)$$

which play an important role in electron gas theory (6), but we may also draw the inspiration for picking them up from an inspection of the potential term in eq. (2.1). We note that the vacuum of the operators $A_{\mathbf{q}; s, s'}$ is the Hartree-Fock ground state $|O\rangle$,

$$A_{\mathbf{q}; s, s'} |O\rangle = 0 \quad (2.5)$$

The creation operators $A_{\mathbf{q}; s, s'}^{\dagger}$ generate states of momentum \mathbf{q} , when acting on $|O\rangle$. Instead of the operators $A_{\mathbf{q}; s, s'}$ we may consider

operators $A_{\mathbf{q}; S; S_z}^+$ which generate states possessing definite spin quantum numbers S, S_z ,

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{q}; 1; 0}^+ &= 2^{-1/2} (A_{\mathbf{q}; 1/2, 1/2}^+ + A_{\mathbf{q}; -1/2, -1/2}^+) \\ A_{\mathbf{q}; 1; 1}^+ &= A_{\mathbf{q}; 1/2, -1/2}^+ \\ A_{\mathbf{q}; 1; -1}^+ &= A_{\mathbf{q}; -1/2, 1/2}^+ \\ A_{\mathbf{q}; 0; 0}^+ &= 2^{-1/2} (A_{\mathbf{q}; 1/2, 1/2}^+ - A_{\mathbf{q}; -1/2, -1/2}^+) . \end{aligned} \tag{2.6}$$

However, for the sake of clarity, we will omit from now on the spin quantum numbers, but we will take spin into account when performing actual computations. We write, therefore, instead of eqs. (2.2) and (2.3),

$$A_{\mathbf{q}}^+ = N_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k} < k_F, |\mathbf{k} + \mathbf{q}| > k_F} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{k}} \tag{2.2'}$$

$$\langle O | A_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}}^+ | O \rangle = 1 . \tag{2.3'}$$

We believe that the operators $A_{\mathbf{q}}$ are a good choice as boson operators because, if we consider quantities such as

$$\langle O | A_{\mathbf{q}}^2 (A_{\mathbf{q}}^+)^2 | O \rangle = 2 - N_{\mathbf{q}}^2 , \tag{2.7}$$

we find that the deviation from the ideal boson behaviour is very small, $N_{\mathbf{q}}^2$ being of the order of the inverse of the number of particles. If the $A_{\mathbf{q}}$ were true boson operators the right hand side of eq. (2.7) would be exactly 2.

It is now convenient to define the states

$$\begin{aligned} |\mathbf{q}\rangle &= A_{\mathbf{q}}^+ | O \rangle \\ |\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2\rangle &= A_{\mathbf{q}_1}^+ A_{\mathbf{q}_2}^+ | O \rangle, \text{ etc.} \end{aligned} \tag{2.8}$$

and to introduce the hamiltonian

$$\begin{aligned} H_B &= E_{HF} + \sum_{\mathbf{q}} \varepsilon_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}}^+ A_{\mathbf{q}} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} g_{\mathbf{q}} (A_{\mathbf{q}}^+ A_{-\mathbf{q}}^+ + A_{-\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}}) . \end{aligned} \tag{2.9}$$

This hamiltonian is equivalent to H , in the sense that

$$\begin{aligned} \langle O | H_B | \mathbf{q} \rangle &= \langle O | H | \mathbf{q} \rangle, \\ \langle \mathbf{q}_1 | H_B | \mathbf{q}_2 \rangle &= \langle \mathbf{q}_1 | H | \mathbf{q}_2 \rangle \\ \langle O | H_B | \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \rangle &= \langle O | H | \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \rangle \end{aligned} \quad (2.10)$$

provided

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{q}} &= \langle \mathbf{q} | H | \mathbf{q} \rangle - \langle O | H | O \rangle \\ g_{\mathbf{q}} &= \langle \mathbf{q}, -\mathbf{q} | H | O \rangle. \end{aligned} \quad (2.1)$$

In the next section we will give explicit expressions for these quantities. We remark that the operator H_B is a truncated Hamiltonian, appropriate only for the harmonic approximation. The full equivalence between H and H_B in the subspace spanned by the vectors $|O\rangle, |\mathbf{q}\rangle, |\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2\rangle, \dots$, requires that anharmonic terms be included in eq. (2.9). We try to bring H_B to the diagonal form

$$H_B = E_{HF} + E_c + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \theta_{\mathbf{q}}^+ \theta_{\mathbf{q}} \quad (2.12)$$

by performing a canonical transformation

$$\begin{aligned} \theta_{\mathbf{q}} &= x_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}} - y_{\mathbf{q}} A_{-\mathbf{q}}^+, \\ [\theta_{\mathbf{q}}, \theta_{\mathbf{q}'}] &= 0, \quad [\theta_{\mathbf{q}}, \theta_{\mathbf{q}'}^+] = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

so that

$$x_{\mathbf{q}}^2 - y_{\mathbf{q}}^2 = 1.$$

We arrive finally at the eigenvalue equations

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{q}} x_{\mathbf{q}} + g_{\mathbf{q}} y_{\mathbf{q}} &= \omega_{\mathbf{q}} x_{\mathbf{q}} \\ g_{\mathbf{q}} x_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{q}} y_{\mathbf{q}} &= -\omega_{\mathbf{q}} y_{\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (2.14)$$

which determine the excitation energy

$$\omega_{\mathbf{q}} = (\varepsilon_{\mathbf{q}}^2 - g_{\mathbf{q}}^2)^{1/2}. \quad (2.15)$$

The correlation energy is given by

$$E_c = \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{2} (\omega_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}}). \quad (2.16)$$

However, this correlation energy refers only to collective correlations and not to intrinsic correlations. In order to evaluate intrinsic correlations, an intrinsic hamiltonian may be introduced by an equation analogous to eq. (1.11), or better still, by the method of Villars (7), but this refinement does not seem necessary because the intrinsic correlations appear to be small. The numerical results which we report in the next section show that eq. (2.16) does not suffer from the deficiency of eq. (1.9).

We may observe, in passing, that eqs. (2.14) may also be obtained in the context of Hartree-Fock time-dependent theory. Indeed, eqs. (2.14) determine the time evolution of the nonstationary Slater determinant

$$|\Phi(t)\rangle = \exp\left(\sum_{\mathbf{q}} z_{\mathbf{q}}(t) A_{\mathbf{q}}^{\dagger}\right) |O\rangle$$

where

$$z_{\mathbf{q}}(t) = x_{\mathbf{q}} \exp(-i \omega_{\mathbf{q}} t) + y_{-\mathbf{q}} \exp(i \omega_{\mathbf{q}} t).$$

Imaginary values of $\omega_{\mathbf{q}}$ reveal, therefore, instabilities of the Hartree-Fock state.

3. NUMERICAL RESULTS

We present now the results of the numerical calculation. It is convenient to introduce the constant $\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$ and to specify the density of the electron gas through the mean square radius per electron in units of the Bohr radius, i. e., the parameter $r_s = e^2 m / \alpha k_F$, where k_F is the Fermi momentum. The final results may be expressed in terms of the following sums

$$n_{\mathbf{q}} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k} \in D_{\mathbf{q}}} 1 \quad (3.1)$$

$$t_{\mathbf{q}} = (2m / (N k_F^2)) \sum_{\mathbf{k} \in D_{\mathbf{q}}} ((\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 - k^2) / 2m \quad (3.2)$$

$$u_{\mathbf{k}} = -(4\pi e^2/V) \sum_{\mathbf{k}_1 \in D_{\mathbf{q}}} 1/(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)^2 \quad (3.3)$$

$$v_{1\mathbf{q}} = (2m/(Nk_F^2)) (4\pi e^2/V) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \in D_{\mathbf{q}}} 1/(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)^2 \quad (3.4)$$

$$v_{2\mathbf{q}} = (2m/(Nk_F^2)) (4\pi e^2/V) \sum_{-\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \in D_{\mathbf{q}}} 1/(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{q})^2 \quad (3.5)$$

$$v_{3\mathbf{q}} = (2m/(Nk_F^2)) \sum_{\mathbf{k} \in D_{\mathbf{q}}} (u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - u_{\mathbf{k}}) \quad (3.6)$$

In these expressions, N is the total number of electrons, V is the normalization volume and $D_{\mathbf{q}}$ is the set of values of \mathbf{k} such that $k < k_F, |\mathbf{k} + \mathbf{q}| > k_F$.

In terms of these quantities we may write down expressions for $\epsilon_{\mathbf{q}}$ and $g_{\mathbf{q}}$, but now we must take into account the spin quantum number S of the mode excited. Of course, S is either 0 or 1. We have

$$\epsilon_{\mathbf{q};S} = (k_F^2/2m) ((t_{\mathbf{q}} + v_{3\mathbf{q}} - v_{1\mathbf{q}})/n_{\mathbf{q}}) \quad (3.7)$$

$$+ (1-S) (16/3\pi) \alpha r_s k_F^2 n_{\mathbf{q}}/q^2) \quad (3.8)$$

$$g_{\mathbf{q};S} = (k_F^2/2m) (-v_{2\mathbf{q}} + (1-S) (16/3\pi) \alpha r_s k_F^2 n_{\mathbf{q}}/q^2) \quad (3.9)$$

$$\omega_{\mathbf{q};S} = (\epsilon_{\mathbf{q};S}^2 - g_{\mathbf{q};S}^2)^{1/2}$$

We now observe that

$$v_{2\mathbf{q}} = v_{1\mathbf{q}} - v_{3\mathbf{q}}. \quad (3.10)$$

We have, indeed

$$\begin{aligned} & \sum_{-\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \in D_{\mathbf{q}}} 1/(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{q})^2 \\ &= \sum_{k_1 < k_F, \mathbf{k}_2 \in D_{\mathbf{q}}} 1/(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{q})^2 \\ &- \sum_{k_1 < k_F, |\mathbf{q} - \mathbf{k}_1| < k_F, \mathbf{k}_2 \in D_{\mathbf{q}}} 1/(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{q})^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{k_1 < k_F, k_2 \in D_q} 1 / (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{q})^2 \\
 &- \sum_{|\mathbf{k}'_1 + \mathbf{q}| < k_F, k'_1 < k_F, k_2 \in D_q} 1 / (\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_2) .
 \end{aligned}$$

We also have

$$\begin{aligned}
 &\sum_{k_1, k_2 \in D_q} 1 / (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)^2 \\
 &= \sum_{k_1 < k_F, k_2 \in D_q} 1 / (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)^2 \\
 &- \sum_{k_1 < k_F, |\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}| < k_F, k_2 \in D_q} 1 / (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)^2 .
 \end{aligned}$$

Subtracting these equations we finally prove eq. (3.10), which shows that we need not compute $v_{1\mathbf{q}}$ and $v_{3\mathbf{q}}$ separately, but only $v_{2\mathbf{q}}$. Our final expressions may be written, introducing the new variable $x = q / k_F$,

$$\begin{aligned}
 n_{\mathbf{q}} &= \frac{3}{8} x \left(1 - \frac{1}{12} x^2 \right) && \text{if } x \leq 2 \\
 &= \frac{1}{2} && \text{if } x > 2
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

$$t_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} x^2 . \tag{3.12}$$

For x less than 2 we have computed $v_{2\mathbf{q}}$ by reducing it to a double integral which has been evaluated by the Monte Carlo method. We have then fitted the numerical results by a polynomial in x^2 .

For $x > 2$ the integrations were performed analytically. Our final result is

$$\begin{aligned}
 v_{2_{\mathbf{q}}} &= (3/2 \pi) \alpha r_s (0.10327 x^2 - 0.017215 x^4 - 0.016558 x^6 \\
 &\quad + 0.029059 x^8 - 0.017362 x^{10} + 0.0011048 x^{12} + 0.0031108 x^{14} \\
 &\quad - 0.0014083 x^{16} + 0.00024849 x^{18} - 0.000016165 x^{20}) \text{ if } x < 2 \\
 &= (3/2 \pi) \alpha r_s \left[\frac{11}{15} + \frac{1}{30} x^2 + (4/(3x)) \left(\frac{1}{5} s_1^5 - s_1^4 + s_1^3 \right) \right. \\
 &\quad \left. \times \ln(2 s_1/x) + (4/(3x)) \left(\frac{1}{5} s_2^5 + s_2^4 + s_2^3 \right) \ln(2 s_2/x) \right] \text{ if } x > 2
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

where

$$s_1 = x/2 + 1,$$

$$s_2 = x/2 - 1.$$

The correlation energy becomes finally

$$E_c = \sum_{S=0}^1 (2S+1) \frac{3}{4} \int_0^\infty x^2 (\omega_{\mathbf{q}; S} - \varepsilon_{\mathbf{q}; S}) dx. \tag{3.14}$$

In fig. 1 we have plotted, as a function of r_s , the total value of E_c and the contributions to E_c from each S . We have also plotted, for comparison, the results of Carr et al (8). The accuracy of our simplified calculation is remarkable. We have also found that for $r_s > 9.6$ the Hartree-Fock ground state is unstable (imaginary values for $\omega_{\mathbf{q}; S}$ for low \mathbf{q} and $S = 1$). This indicates that for low densities the anharmonic terms become important and should be added to eq. (2.9). We also show in fig. 1, by the curve labeled «without exchange», the result of neglecting exchange terms, i. e., the result of setting $v_{1_{\mathbf{q}}} = v_{2_{\mathbf{q}}} = v_{3_{\mathbf{q}}} = 0$. The value of E_c obtained in this way is an upperbound (9) to the ground state energy of Wentzel's model (10) (meson-pair theory), which does not include exchange. The values of E_c without exchange are lower (larger in absolute value) than the corresponding values of the correlation energy of Carr et al., in the range of r_s considered. This is so because Carr et al. take exchange

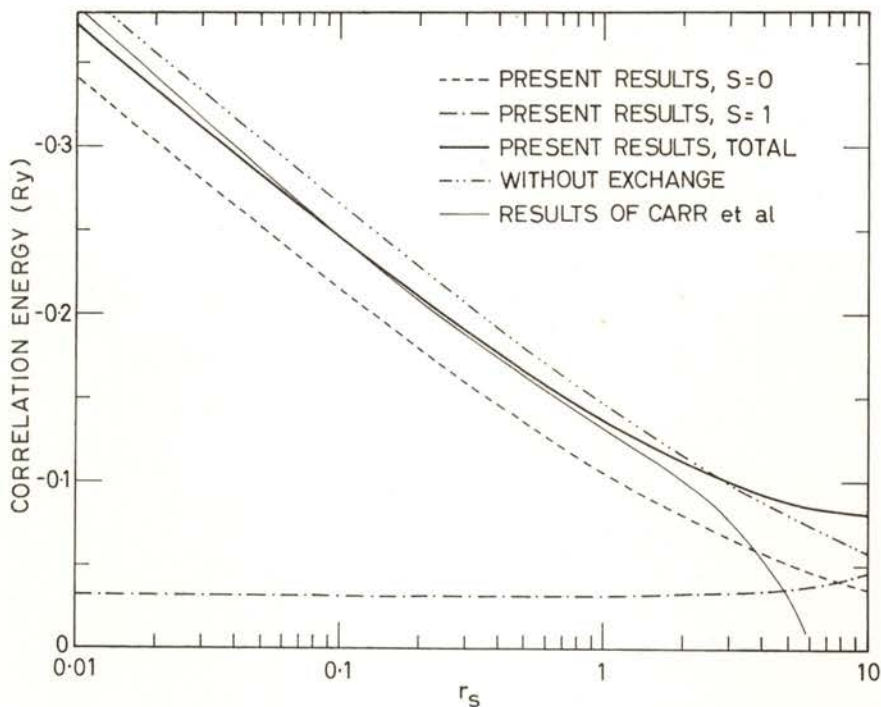


Fig. 1 — The correlation energy as a function of the parameter r_s

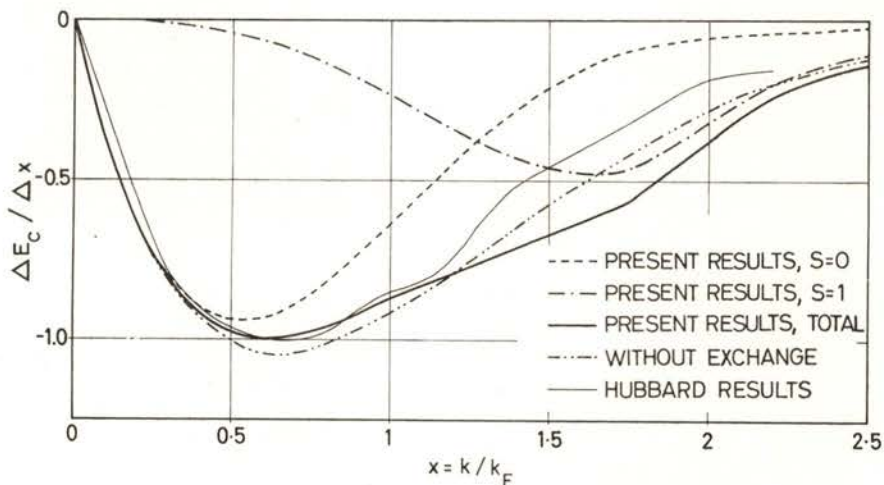


Fig. 2 — The correlation energy per unit of x , for $r_s = 4$

into account and this contributes $+0.046$ Ry per electron to the correlation energy. At low densities, the neglect of exchange in our results provides an excellent approximation (11) to the ground state energy of Wentzel's hamiltonian.

In fig. 2 we plot, for $r_s = 4$, the partial contribution to E_c from each x , per unit of x , i. e., we plot the integrand of eq. (3.14). We also plot the partial contributions to the integrand of eq. (3.14) from each S . Comparison of our results with the results of Hubbard shows good agreement for x not very large. The curve labelled «without exchange» has been obtained by neglecting exchange terms, i. e., by setting $v_{1\mathbf{q}} = v_{2\mathbf{q}} = v_{3\mathbf{q}} = 0$ in our expressions. Exchange terms tend to reduce the absolute value of the correlation energy at low x . At high x the absolute value of the correlation energy is increased by the exchange terms, but then the anharmonic terms of the hamiltonian are probably important.

Finally we wish to emphasize that the present simplified calculation suggests a simple explanation for the discrepancy between eq. (1.9) arising from conventional RPA, and eq. (1.10), arising from partial summation of perturbation theory diagrams, namely, that the discrepancy is due to the violation of the RPA assumptions by noncollective RPA modes.

REFERENCES

- (1) PROVIDENCIA, J. da — *Phys. Rev.* **C1** (1970) 411.
- (2) MARSHALEK, E. R. and WENESER, J. — *Annals of Physics* (N. Y.), **53** (1969), 569.
- (3) FUKUDA, N., IWAMOTO, F. and SAWADA, K. — *Phys. Rev.* **135** (1964), A932.
- (4) PROVIDENCIA, J. da — *Nucl. Phys.* **A116** (1968), 396. *Phys. Letters* **28B** (1968), 82.
- (5) HOLTZWARTH, G. — *Nucl. Phys.* **A113** (1968), 448; **A133** (1969), 161.
- (6) PINES, D. — *The Many-Body Problem* (W. A. Benjamin, Inc., New York, 1961)
- (7) VILLARS, F. — *Nucl. Phys.*, **74** (1965), 353.
- (8) CARR JR., W. J. and MARADUDIN, A. — *Phys. Rev.* **133** (1964), A371.
- (9) PROVIDENCIA, J. da — *Memorias da Acad. das C. de Lisboa* (Classe de Ciências), **XIII** (1969), 219.
- (10) WENTZEL, G. — *Phys. Rev.* **108** (1957), 1593.
- (11) FERREIRA, L. — *Portugaliae Physica*, **5** (1968), 119.

The author wishes to express his gratitude to Professor R. S. Nunes for his assistance in the numerical calculations. A grant from Comissão de Estudos de Energia Nuclear, Instituto de Alta Cultura, is gratefully acknowledged.

STATIONARY STATES WITH MINIMUM ENTROPY PRODUCTION AND NON CONSTANT PHENOMENOLOGICAL COEFFICIENTS

J. J. DELGADO DOMINGOS

Núcleo de Estudos de Engenharia Mecânica
Departamento de Engenharia Mecânica
Instituto Superior Técnico
Lisboa

ABSTRACT — Neglecting second order terms on the dependence of the phenomenological coefficients on the local intensive parameters, a generalization of Prigogine's theorem of minimum entropy production is presented, assuming local validity of Onsager's reciprocal relations.

1. A well known theorem of I. Prigogine [1], [2] shows that for thermodynamic systems in mechanical equilibrium the stationary states have the property of minimum entropy production when:

— The generalized fluxes J_i are linear functions of the generalized forces X_k , the phenomenological coefficients L_{ik} being constants

$$J_i = \sum_k L_{ik} X_k$$

— The Onsager's reciprocal relations have the form

$$L_{ik} = L_{ki}$$

The minimum entropy production is an important physical property but its interest is severely restricted by the condition of constant phenomenological coefficients, because the L_{ik} are functions of X_k , their constancy being only acceptable when the system as a whole is not far from equilibrium.

2. To deal with the realistic situation of non constant phenomenological coefficients, Glansdorff and Prigogine [2] considered later a more general theorem where it is proved that:

$$\frac{\partial_x P}{\partial t} = \int_v \sum_i J_i \frac{\partial X_i}{\partial t} dv \leq 0$$

However, no conclusion could be reached about the relative value of

$$\frac{\partial J_P}{\partial t} = \int_v \sum_i \frac{\partial J_i}{\partial t} X_i dv$$

Preventing therefore a generalization regarding the sign of the total entropy production:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial_{\times} P}{\partial t} + \frac{\partial J_P}{\partial t}$$

The purpose of the present note is to show that in the stationary states the entropy production is indeed a minimum, provided that second order terms (on the dependence of L_{ik} in F_k , local intensive variables) are neglected, which is wholly acceptable within the present scope of non — equilibrium theories.

3.1 — In non equilibrium-thermodynamics, it is always assumed, as a first order approximation, that there is a local equilibrium and this assumption seems to have become a basic postulate even for higher order approximations through the introduction of hidden coordinates.

If we assume local equilibrium, the local values of L_{ik} have also a well defined value. For the stationary state, the generalized forces and fluxes are no longer time-dependent, though a function of space coordinates if the thermodynamic system is not in equilibrium.

This means that in the stationary states the L_{ik} depend only on the space coordinates and, neglecting second order terms, they stay at their local values for small perturbations on X_k around the stationary state.

Therefore, around the stationary state, where $F_k = F_k^0$ we have the local relation

$$J_i = \sum_k L_{ik}(F_k^0) X_k$$

from which follows

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_i}{\partial t} &= \sum_k L_{ik}(F_k^o) \frac{\partial X_k}{\partial t} \\ X_i \frac{\partial J_i}{\partial t} &= \sum_k L_{ik}(F_k^o) X_i \frac{\partial X_k}{\partial t} \\ \sum_i X_i \frac{\partial J_i}{\partial t} &= \sum_k L_{ik}(F_k^o) X_i \frac{\partial X_k}{\partial t} \\ &= \sum_k J_k \frac{\partial X_k}{\partial t} \\ &= \sum_i J_i \frac{\partial X_i}{\partial t} \end{aligned}$$

where it has been assumed that the Onsanger's relations hold good :

$$L_{ik}(F_k^o) = L_{ki}(F_k^o)$$

Integration on the whole system gives

$$\int_v \sum_i X_i \frac{\partial J_i}{\partial t} dv = \int_v \sum_i J_i \frac{\partial X_i}{\partial t} dv$$

or

$$\frac{\partial J_P}{\partial t} = \frac{\partial_{\times} P}{\partial t}$$

But Glansdorff and Prigogine have already proved [2] that

$$\frac{\partial_{\times} P}{\partial t} \leq 0$$

It follows, for the stationary state, that even in this case of non constant phenomenological coefficients it is

$$\frac{\partial P}{\partial t} \leq 0$$

3.2 — The previous derivation shows that it is sufficient local equilibrium, not overall equilibrium for the system as implied for example by De Groot and Mazur [2, p. 46]. Indeed, for arbitrarily large systems, we can have arbitrarily large variations of X_k and the whole system remaining far from equilibrium, while local equilibrium prevails throughout. This condition of local equilibrium must be stressed because it is, as referred, one of the basic assumptions of modern non-equilibrium theories.

4. — More recently, Glansdorff and Prigogine introduced the concept of a local potential as a generalization of their relation $\frac{\partial_x P}{\partial t}$ for systems not in mechanical equilibrium or with non-constant phenomenological coefficients, aiming at a formulation of a general evolutions criterion in macroscopic physics. In this sense, non-stationary states are considered as well. This formulation is not unique and, as have been shown elsewhere [5], suffers from several drawbacks to be considered a general formulation; moreover, some demonstrations which have been promised have not yet been published and a few doubts arise if they ever will be. This fact impaires its value as a tool for the solution of practical problems by variational methods.

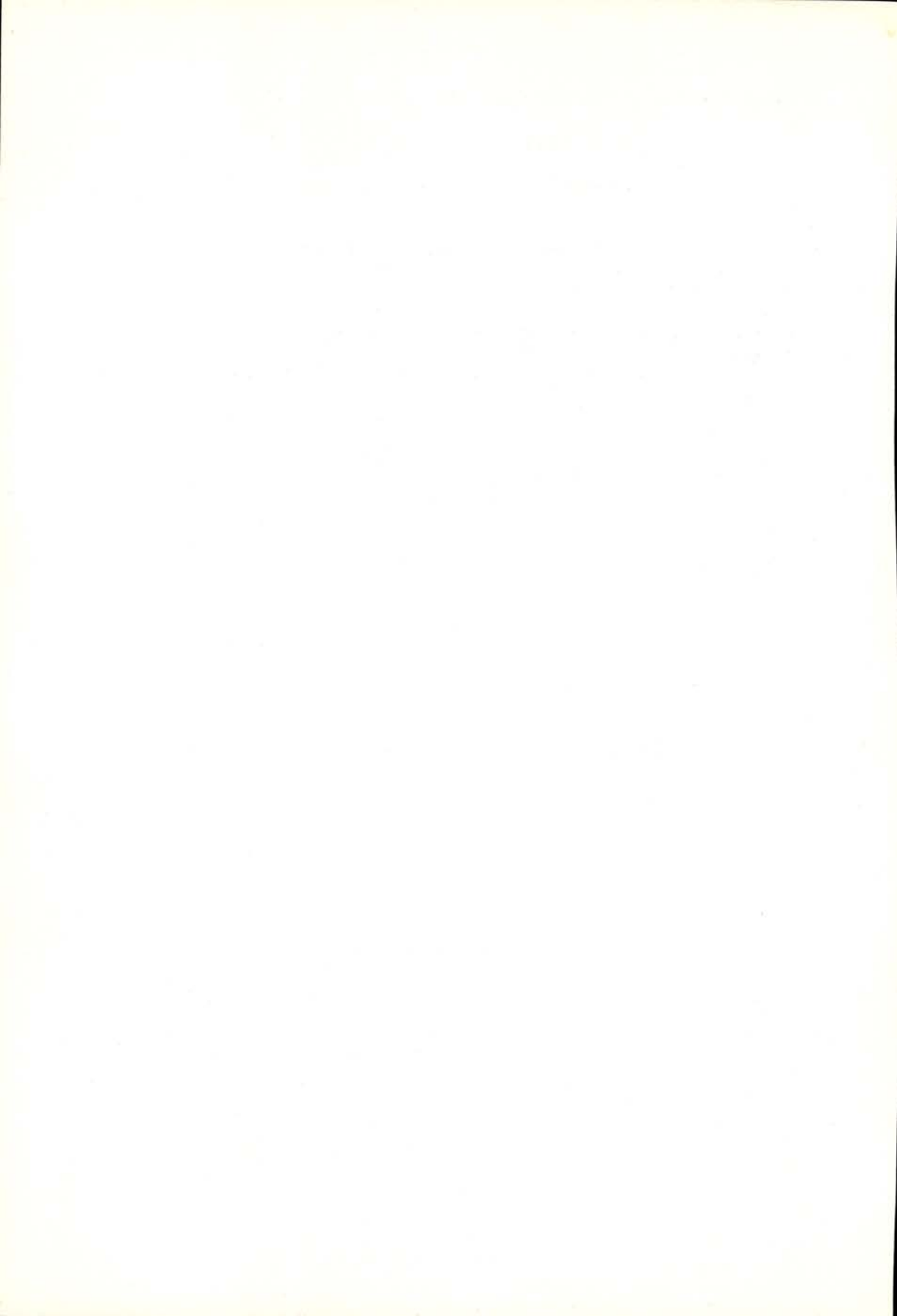
Whit the basic, and physically intuitive, derivation of the present note, the same results of the general evolution criterion can be more easily achieved as has already been shown on a different context [5].

5. — The present contribution can be summarized as follows — assuming the physical validity of Prigogine's theorem of minimum entropy production for stationary states, a generalization for non constant phenomenological coefficients, neglecting second order terms on the dependence of the phenomelogical coefficients on the generalized forces, is proposed.

The results of the «general evolution criterion of macroscopic physics» due to Glansdorff and Prigogine can be more easily obtained with the present type of approach if some of the objections on that work are removed.

REFERENCES

- (1) PRIGOGINE, I. — «Thermodynamique des Phénomènes Irreversibles», *Deseer Liège*, 1947.
- (2) DE GROOT, S. R. — *Non-Equilibrium Thermodynamics Nort-Holland*, 1962.
- (3) DOMINGOS, J. J. D. — «As equações fundamentais em mecânica dos fluidos e transmissão do calor». *Rev Port. Quím.* 8, 88, 1966.
- (4) DOMINGOS, J. J. D. — «O mínimo de produção de entropia no escoamento uniforme dum fluido newtoniano». *Técnica*, 29, 61, 1966.
- (5) GLANSDORFF, P. et PRIGOGINE, I. — «On a general evolution criterion in Macroscopic Physics». *Physica*, 30, 251, 1964.
- (6) DOMINGOS, J. J. D. — «Métodos variacionais em mecânica dos fluidos e transmissão do calor». *Técnica*, 30, 1, 1967.



LES RESONANCES EN PHYSIQUE DES HAUTES ENERGIES *

par R. NATAF

Institut de Physique Nucléaire — Division de Physique Théorique — B. P. 1 — 91 Orsay

SOMMAIRE — On indique d'abord les diverses définitions possibles de l'objet «résonance», et les critères qui permettent d'en identifier une.

— On rappelle la classification par SU_3 des particules et résonances.

Un prolongement de cette classification est la description à l'aide d'un modèle de «quarks» non Relativiste, qui s'accorde avec SU_6 .

Une idée tout à fait différente est celle du «bootstrap» qui s'appuie sur les hypothèses générales de Chew et Mandelstam concernant la matrice S : unitarité; analyticité maximale; croisement.

— On indique aussi l'idée de trajectoires de Regge, et son accord avec le diagramme de Chew et Frautschi.

— Enfin, les résultats précis du modèle des quarks non relativiste sont donnés pour les baryons et les mésons.

ABSTRACT — First are presented the different possible definitions of a resonance, and the criteria used for finding one resonance.

— The SU_3 classification of particles and resonances is reminded.

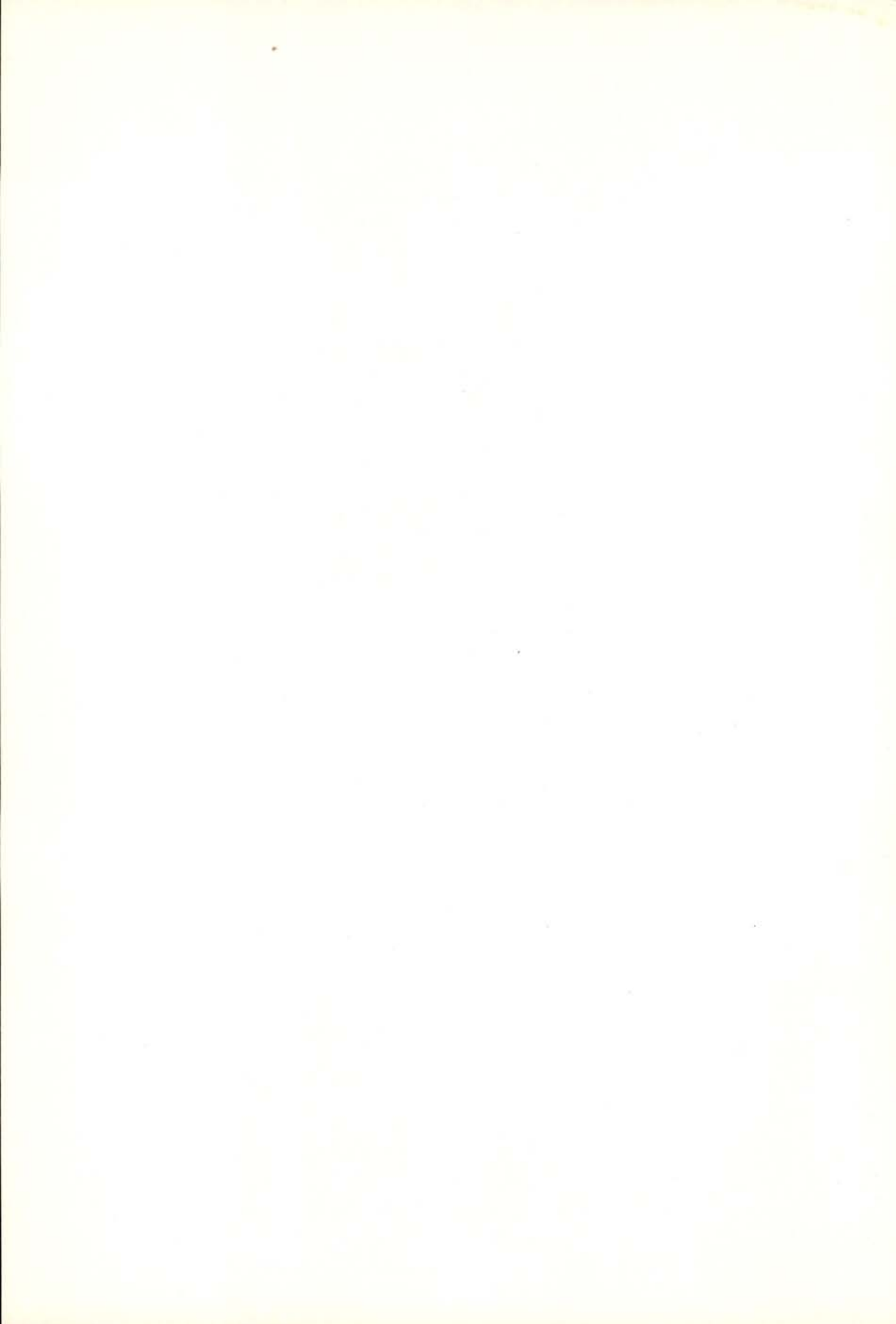
An extension of this classification is the non Relativistic quark model, which fits SU_6 .

A quite different idea is the bootstrap, using the general conjectures of Chew and Mandelstam on S matrix: unitarity, maximal analyticity, and crossing.

— Also is presented the idea of Regge trajectories, and its agreement with the Chew-Frautschi plot.

— Finally are given the precise results of the non Relativistic quark model for baryons and mesons.

* Exposé général fait au «Seminário de Teorias Físicas e Física Nuclear» de Lisbonne (Instituto Superior Técnico), mai 1970.



QU'EST-CE QU'UNE RÉSONANCE ?

Il y a actuellement plusieurs centaines de particules et résonances connues (une centaine de multiplets de charge).

Nous parlons ici des particules ayant des interactions fortes ou *hadrons*.

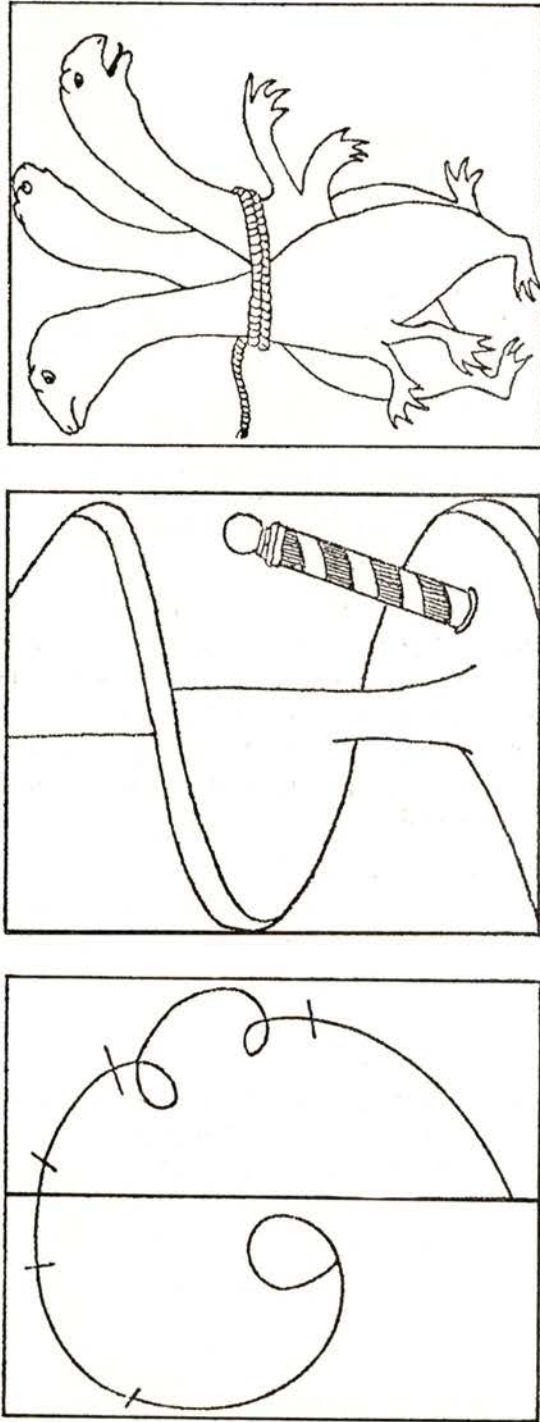
Nous appelons *particules* celles qui sont stables ou se désintègrent par processus faible ($\tau \gtrsim 10^{-8}$ à 10^{-10} s.), ou par processus électromagnétique ($\tau \approx 10^{-14}$ à 10^{-16} s.), et *résonances* celles qui se désintègrent par voie forte ($\tau \approx 10^{-21}$ à 10^{-23} s.) et qui ont donc une largeur appréciable ($\Gamma = \hbar/\tau$). Cependant, la classification par SU_3 a obtenu le succès que l'on sait en ne faisant pas de distinction fondamentale entre particules et résonances.

Les figures 1, tirées de l'article de Moravcsik sur la Conférence de Vienne (1968) dans *Physics Today*, illustrent de manière amusante les différents critères qui ont été adoptés, suivant le temps ou la nature des physiciens, pour caractériser une résonance.

— La première fait allusion au «diagramme d'Argand» où l'on porte pour une onde partielle l , sur le plan complexe de l'amplitude diffusée T_l ($Re T_l$ et $Im T_l$), les valeurs de T_l pour différentes énergies.

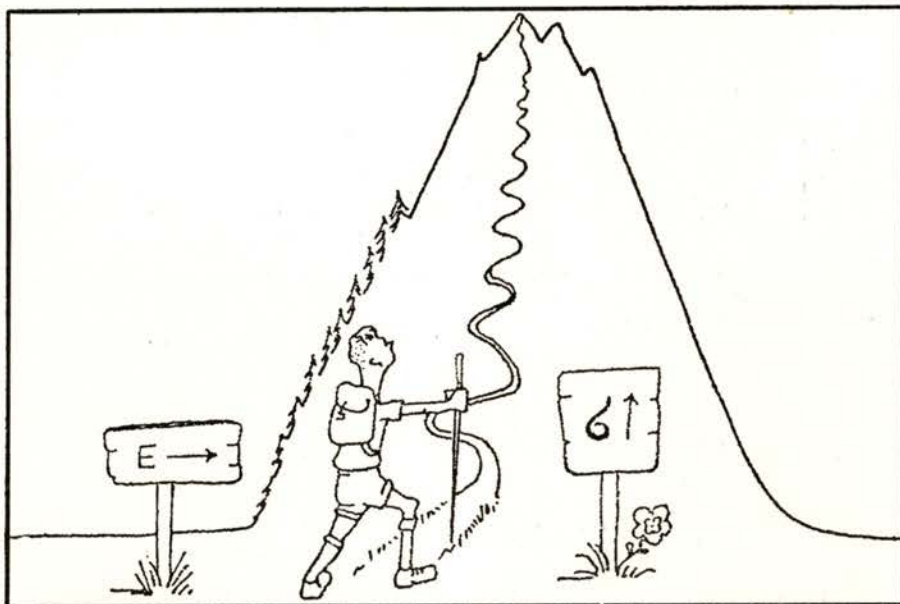
$$T_l = \frac{S_l - 1}{2i}$$

(S_l élément de la matrice de diffusion).



... it is not clear whether what we mean by resonance is a counterclockwise loop in the Argand diagram, a pole on the second Riemann sheet, a bound state of quarks, or ...

Figure 1



... an experimental peak» (Another concept of resonance)

Figure 1

Cette méthode a été très utilisée pour identifier les résonances N^* dans la diffusion π - N , par Bareyre et al.

Dans le cas où il n'y a que de la diffusion élastique $S_l = e^{2i\delta_l}$, avec δ_l réel.

Le lieu de T_l est le cercle de la figure 2, et quand l'énergie E dans le c. m. varie $T_l(E)$ décrit une partie de ce cercle; il y a résonance

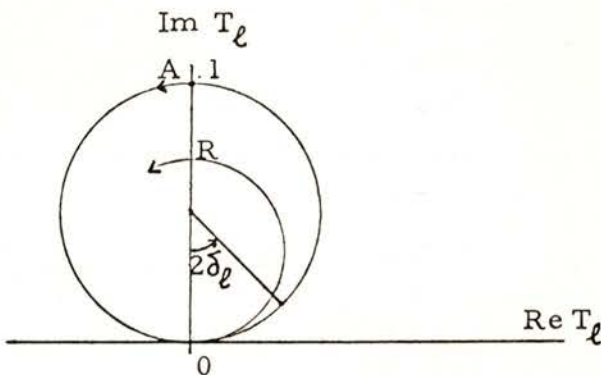


Figure 2

quand δ_l passe par $\frac{\pi}{2}$ en croissant, c'est à dire quand le point figuratif passe par A dans le sens direct.

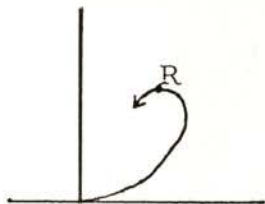


Figure 3

Avec l'inélasticité: $\delta_l \rightarrow \delta_l + i\alpha_l$, $\alpha_l > 0$ et l'on peut avoir un diagramme comme celui de la figure pour le passage à la résonance R. Des décalages sont aussi possibles à cause d'un «fonds continu» (figure 3).

Actuellement, il y a des doutes sérieux sur la non ambiguïté de ce critère.

— La seconde fait allusion à la définition théorique la plus simple et la plus claire.

Elle équivaut à :

$$\text{Résonance} = \text{amplitude Breit-Wigner} + \text{fonds} \rightarrow \begin{cases} \text{pic pour } \sigma_l(E) \\ \text{pôle dans le 2}^{\text{ème}} \text{ feuillet } E \end{cases}$$

Le pôle dans le 2^{ème} feuillet de la variable énergie E prolongée dans le domaine complexe, s'obtient déjà quand on étudie la diffusion potentielle N. R. ⁽¹⁾ par l'équation de Schrödinger. On trouve alors que $S_l(k)$, où k est la quantité de mouvement dans le c. m.

$\left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{réduite}}}\right)$, peut avoir des pôles qui s'interprètent de la manière indiquée sur la figure 4.

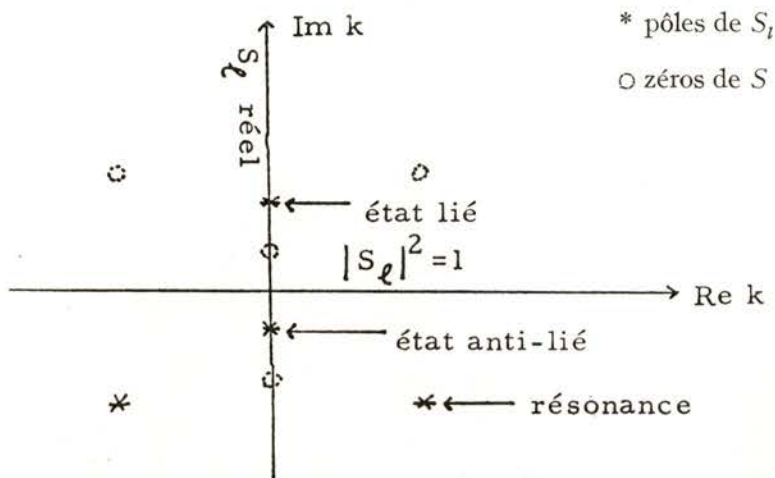


Figure 4

(1) Abréviation pour «non Relativiste».

Un pôle du demi plan inférieur, en $k_0 - i\gamma$ ($\gamma > 0$) donne, quand on l'isole dans $S_l(k)$ et qu'on le combine avec le zéro symétrique

$$T_l = \underbrace{\frac{-\gamma}{k - k_0 + i\gamma}}_{\text{amplitude de Breit-Wigner}} + R_l(k)$$

Pour $k_0 = 0$, on l'appelle état anti-lié (ex. 1S_0 du deuteron).

Sur le demi-plan supérieur, on n'a que des états liés en $k = i\kappa$.

En passant à la variable $E \propto k^2$, on a :

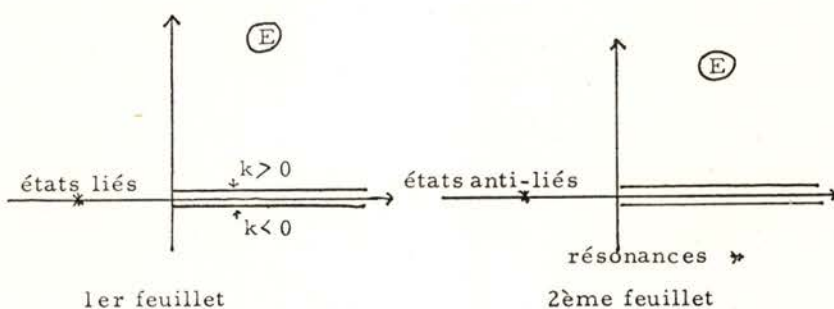


Figure 5

Expérimentalement, on verra surtout un pic (dernière figure).

— Enfin la troisième figure de Moravcsik fait allusion au modèle des quarks dont nous parlerons assez longuement.

Comme n'importe quel pic n'est pas nécessairement une résonance, on prend les critères expérimentaux suivants :

1. Un état résonnant doit avoir, en plus d'une masse et d'une largeur définies, un ensemble bien défini de nombres quantiques.

2. La même résonance avec les mêmes caractéristiques doit apparaître dans tous les canaux qui peuvent être couplés à cet ensemble particulier de nombres quantiques (en particulier indépendamment de l'énergie, si elle est supérieure au « seuil »). En conséquence chaque résonance doit, en principe, être produite dans les expériences de production, où elle doit apparaître dans l'état final.

Maintenant, comment essayer de faire une théorie de toutes ces résonances et particules, de leurs interactions ?

On peut dire qu'il y a actuellement deux grands ensembles d'idées.

1^o) Un de ces ensembles provient surtout de *Gell-Mann*.

Il a commencé avec la classification des particules et résonances en multiplets de SU_3 , qui a eu un grand succès (prédiction du Ω^-). On savait que les interactions fortes conservaient l'isospin, c'est à dire qu'elles étaient invariantes par le groupe de symétrie interne SU_2 équivalent au groupe des rotations dans un espace à 3 dimensions. Ceci se traduit par l'existence de *multiplets d'isospin* comme le doublet $\begin{pmatrix} P \\ N \end{pmatrix}$ où $2I + 1 = 2 \rightarrow I = \frac{1}{2}$, le triplet $\begin{pmatrix} \pi^+ \\ \pi^0 \\ \pi^- \end{pmatrix}$ où $2I + 1 = 3 \rightarrow I = 1$, chaque membre du multiplet ayant un I_3 différent ($I_3 = -I, -I + 1, \dots, I$).

S'il n'y avait pas d'interactions électromagnétiques, à côté des interactions fortes, tous les membres d'un multiplet auraient la même masse; les interactions électromagnétiques qui ne conservent pas I , mais seulement I_3 , lèvent cette dégénérescence, comme un champ magnétique \vec{B} lève la dégénérescence sur le nombre quantique magnétique m dans un atome.

Beaucoup de théoriciens avaient déjà supposé une «hiérarchisation» plus grande des interactions avec une interaction *très forte* ayant une symétrie plus étendue que SU_2 et qui donnerait à elle seule une dégénérescence de masses encore plus grande. L'interaction *moyennement forte* lèverait en partie cette dégénérescence donnant les multiplets de SU_2 , c'est à dire d'isospin, ci-dessus.

Sakata avait proposé la symétrie U_3 (unitaire à 3 dimensions)

avec le triplet fondamental $\begin{Bmatrix} P \\ N \\ \Lambda \end{Bmatrix}$, mais Gell-Mann et Ne'eman ont

proposé SU_3 (unitaire unimodulaire) où Nucléon, Λ , Σ , Ξ appartiennent à un même *octet* (8 fold-way).

On représente ces multiplets de SU_3 par des diagrammes à deux dimensions où l'on porte I_3 en abscisse, Y en ordonnée; Y est l'*hypercharge* figurant dans la formule de Gell-Mann et Nishijima:

$$(1) \quad Q = I_3 + \frac{1}{2} Y$$

$$Y = \begin{matrix} B & & + S \\ \downarrow & & \downarrow \\ \text{nombre baryonique} & & \text{étrangeté} \end{matrix}$$

$$\begin{cases} B = 1 & \text{pour les baryons,} & B = -1 & \text{pour les antibaryons} \\ B = 0 & \text{pour les mésons.} \end{cases}$$

Octet des barions $\frac{1}{2}^{(1)}$ + Décuplet des baryons $\frac{3}{2}^{(1)}$ +

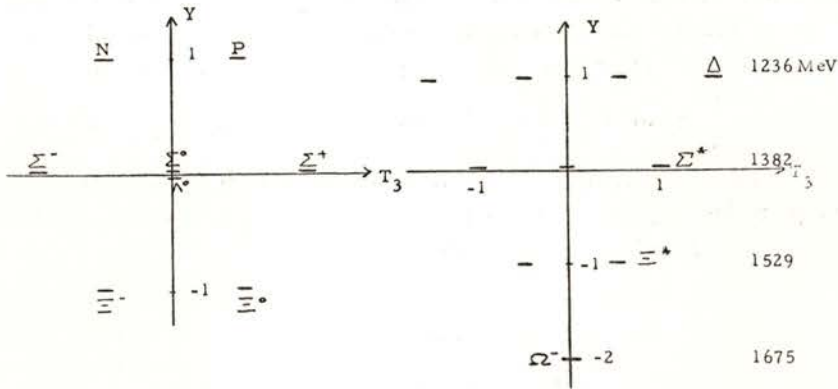


Figure 6

Nous ne parlerons pas ici d'un prolongement de SU_3 prévu par Gell-Mann dans l'«algèbre des courants» appartenant à des multiplets de SU_3 , qui a donné certaines relations dynamiques pour les interactions fortes, souvent bien vérifiées expérimentalement.

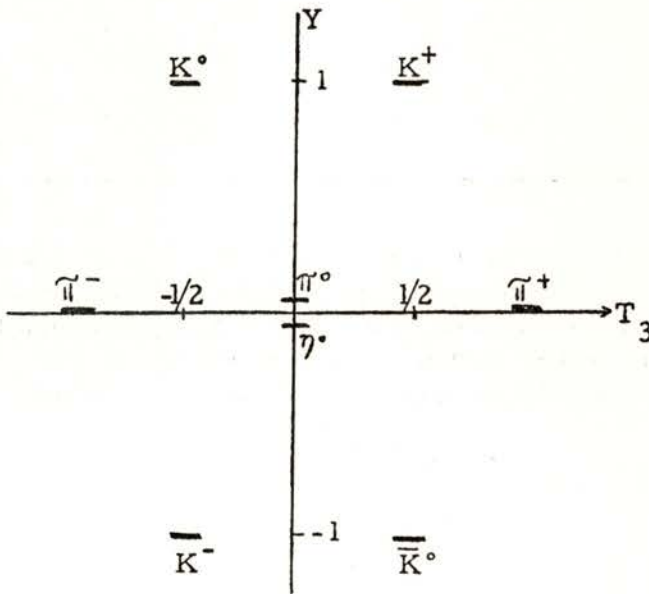


Figure 7. Octet des mésons $0^{- (1)}$

(1) Ces nombres et ces signes indiquent le spin et la parité intrinsèque des particules.

Une manière simple de retrouver SU_3 est d'admettre que toutes les particules et résonances sont constituées de trois particules fondamentales, formant le triplet de base de SU_3 , et de leurs antiparticules. Pour obtenir l'octet des baryons, il faut alors mettre ensemble 3 de ces particules, et comme $B = 1$ pour les baryons, il faut donc que $B = \frac{1}{3}$ pour chacune. A cause de (1), elles auraient aussi des charges fractionnaires. Gell-Mann les a baptisées «quarks». On peut les appeler p, n, λ qui ont respectivement mêmes nombres quantiques J^P, I et S que P, N, Λ .

TABLEAU I
Nombre quantiques des quarks

	J^P	I	I_3	S	B	Y	Q
p	$\frac{1}{2}^+$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$
n	$\frac{1}{2}^+$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$
λ	$\frac{1}{2}^+$	0	0	-1	$\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$

Le modèle des quarks permet même de sauver une symétrie plus étendue qui avait été proposée par certains théoriciens et qui a conduit à quelques prévisions exactes. Ils avaient proposé que les interactions très fortes soient non seulement invariantes par SU_3 , mais aussi indépendantes du spin, ce qui permet de considérer le groupe plus étendu

$$SU_6 \supset SU_3 \otimes SU_2$$

$$\begin{array}{ccc} \downarrow & & \downarrow \\ \text{symétrie} & & \text{spin.} \\ \text{interne} & & \end{array}$$

Mais dès que les particules sont en mouvement, l'invariance par rapport au spin doit être cassée par les couplages spin-orbite, a fortiori quand les vitesses sont Relativistes. La seule manière de sauver

une certaine invariance par SU_6 semble être de construire un modèle à quarks non Relativistes. On peut imaginer par exemple un puits de potentiel moyen où les 3 quarks constituants seraient placés, assez profond pour que l'énergie de liaison par quark soit grande, et de forme telle que leur énergie cinétique moyenne reste faible (ceci est réalisable avec un puits carré). Les forces spin-orbite et spin-spin étant négligeables, les niveaux d'énergie du système correspondront aux multiplets de SU_6 ; quand on atteint les niveaux élevés, on peut penser que l'invariance est cassée par les forces spin-orbite, mais elle garde une valeur pour classer les états.

2^o) Un autre ensemble d'idées provient surtout de *Chew* et de *Mandelstamm*.

On admet généralement que les quarks, s'ils existent, sont lourds $M \geq 3 Ge V$, et même plus ≈ 10 à $20 Ge V$, ce qui expliquerait le succès des «formules de masse» dans un multiplet de SU_3 , où l'on traite l'interaction moyennement forte comme une perturbation.

Donc si un méson est formé d'un quark et d'un antiquark, comme $\pi^+ = \bar{n} p$, on voit que pour en extraire ces quarks, il faut fournir une énergie incomparablement plus grande ($\geq 6 Ge V$) que la masse du π^+ ($139 Me V$), énergie sensiblement égale à la masse des particules «extraites». Ceci n'a plus rien à voir avec la notion usuelle de constituant d'un atome ou d'un noyau que l'on peut extraire avec une énergie qui est quelques % de sa masse (atome : $10 e V$ à $10 ke V$ devant $500 ke V$; noyau $\approx 10 Me V$ devant $1000 Me V$).

Ceci a rendu beaucoup de théoriciens sceptiques sur la valeur d'un modèle à constituants fondamentaux, analogue à ceux de l'atome et du noyau. Leur idée est que, au contraire, dans ce domaine des particules, on ne saurait dire qu'une particule est constituée par d'autres plus fondamentales, mais que l'on peut considérer chacune comme constituée par toutes autres possibles d'après la conservation des nombres quantiques fondamentaux internes (B, I, I_3, Y) ou externes (spin, parité...). Ainsi on peut considérer un π comme constitué d'un N et d'un \bar{N} , d'un N^* et \bar{N}^* , d'un Δ et d'un $\bar{\Delta}$, etc.. (Δ est la résonance πN $I = 3/2, J = 3/2^+$ de la figure 6 ci-dessus à $1236 Me V$). De même $N^* = \pi N$, etc..

De cette façon aucun des hadrons n'est privilégié, et c'est ce que *Chew* appelle une «*démocratie des particules*» opposée à l'«*aristocratie*» du modèle des quarks.

On appelle aussi cette idée le «bootstrap» d'après une aventure du baron de Münchhausen qui monta jusqu'à la lune en tirant sur ses tirants de botte; car un N^* par exemple peut être formé d'un N et d'un π , ceux-ci sont eux-mêmes liés par l'échange de particules comme 2π par exemple; or π lui-même = $N\bar{N}$, etc..

Chew est même convaincu que la hiérarchie des interactions qui se manifeste dans SU_3 doit provenir elle-même de cette dynamique démocratique, comme le modèle en couches du noyau sort d'un ensemble de nucléons jouant tous le même rôle.

Mais ces idées conduisent à des théories extrêmement compliquées par l'existence même d'un très grand nombre de particules et résonances (des tentatives de bootstrap, pas bien concluantes, ont été faites avec des ensembles restreints).

En pratique, il faut bien prendre certaines résonances connues pour simplifier les choses, par exemples le ρ comme ensemble $\pi\pi$, c'est à dire une démocratie avec des «corps constitués».

Toute démocratie pour être viable exige des «vertus» si l'on en croit Montesquieu, ou disons des principes. A la base des idées de Chew-Mandelstamm se trouvent 3 grands principes :

1 — UNITARITÉ DE LA MATRICE S

Celle-ci est seulement une conséquence des postulats généraux de la Mécanique Quantique : conservation de la probabilité, c'est à dire si $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$

$$\sum_b P_{a \rightarrow b} = 1$$

Elle se traduit par :

$$S S^+ = S^+ S = 1$$

2 — ANALYTICITÉ MAXIMALE

3 — CROISEMENT

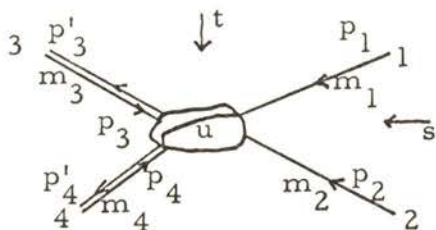


Figure 8

Ces deux derniers principes sont assez mêlés. Pour les expliquer prenons un processus

2 particules \rightarrow 2 particules, soit

$$1 + 2 \rightarrow 3 + 4$$

L'idée du croisement est celle de la comparaison de

$$1 + 2 \rightarrow 3 + 4 \quad (1)$$

à :

$$1 + \bar{3} \rightarrow \bar{2} + 4 \quad (\bar{i} \text{ antiparticule de } i) \quad (2)$$

et :

$$1 + \bar{4} \rightarrow 3 + \bar{2} \quad (3)$$

les \bar{i} ayant des 4-quantités de mouvement opposées à celles des i .

Cette comparaison peut sembler illusoire.

En effet, prenons $\vec{p}_3 = -\vec{p}'_3$, $\vec{p}_4 = -\vec{p}'_4$ de manière que tous les p_i soient entrants (on prendra des p'_i opposés aux p_i pour les particules i effectivement sortantes dans chacun des processus). Les quantités

$$\begin{cases} s = (E_1 + E_2)^2 - (\vec{p}_1 + \vec{p}_2)^2 = (E_3 + E_4)^2 - (\vec{p}_3 + \vec{p}_4)^2 \\ t = (E_1 + E_3)^2 - (\vec{p}_1 + \vec{p}_3)^2 = (E_2 + E_4)^2 - (\vec{p}_2 + \vec{p}_4)^2 \\ u = (E_1 + E_4)^2 - (\vec{p}_1 + \vec{p}_4)^2 = (E_2 + E_3)^2 - (\vec{p}_2 + \vec{p}_3)^2 \end{cases}$$

sont des invariants Relativistes (on a tenu compte pour écrire les secondes égalités de : $\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4 = 0$, exprimant la conservation de l'énergie-impulsion).

Leurs domaines de variations sont différents et déconnectés quand on considère les 3 réactions (1-2-3). Pour (1) :

s représente le carré de l'énergie dans le c. m. ($\vec{p}_2 = -\vec{p}_1$)

t le transfert de quantité de mouvement entre 1 et 3

u le transfert de quantité de mouvement entre 1 et 4

(Noter que l'on a toujours en fait : $s + t + u = \sum m_i^2$), de sorte que l'on a :

$$s \geq s_0 = \text{Max} \begin{cases} (m_1 + m_2)^2 \\ (m_3 + m_4)^2 \end{cases}$$

tandis que $t < 0$, $u < 0$ en général.

Au contraire dans (2),

$$t \geq t_0 = \text{Max} \begin{cases} (m_1 + m_3)^2 \\ (m_2 + m_4)^2 \end{cases}$$

tandis que $s < 0$, $u < 0$ en général.

La comparaison a un sens si l'on suppose qu'une même amplitude $M(s, t, u)$ prend la valeur voulue pour chaque réaction suivant le domaine de variation correspondant. Ceci n'a de sens qu'en l'absence de singularités formant barrière entre les différents domaines.

L'hypothèse *d'analyticité maximale* dit qu'il n'y en a pas, dans le plan complexe de ces variables et sur le 1er feuillet «physique», en dehors de l'axe réel, de sorte que l'on peut passer de l'un à l'autre des domaines en passant dans le plan complexe.

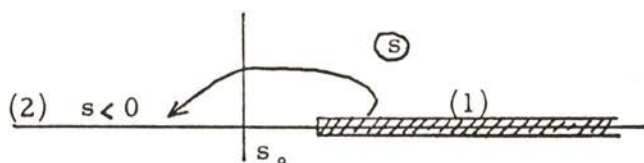


Figure 9

Les réactions (1), (2), (3) sont dites celles des voies physiques s , t et u respectivement.

Sur l'axe réel s , il y nécessairement des singularités pour $s > s_0$, car la relation d'unitarité l'exige.

Ces trois principes ont joué un rôle fondamental dans toutes les études théoriques depuis une quinzaine d'années: relations de dispersion, etc..

Les deux derniers ont d'ailleurs été démontrés dans certains cadres (cf. plus haut diffusion potentielle, théorie des champs en perturbation, etc.).

Enfin, une dernière idée de Chew s'est révélée très féconde bien qu'elle paraisse très curieuse a priori: c'est celle de l'analyticité maximale dans le plan de la variable complexe l , étendant les valeurs possibles du moment orbital, qui ne prend pourtant que les valeurs entières $l = 0, 1, 2, \dots$

L'idée est la suivante. Se plaçant dans la voie t , on peut développer l'amplitude $M_t(s, t)$ en ondes partielles (nous supposons les particules sans spin); \sqrt{t} est ici l'énergie dans le c. m. ($\vec{p}_1 + \vec{p}_3 = 0$), s est le transfert lié à l'angle de diffusion ($\vec{p}_1, \vec{p}'_2 = \theta_t$) par :

$$\begin{aligned} \rightarrow s &= \frac{\sum}{2} - \frac{t}{2} - \frac{(m_1^2 - m_3^2)(m_2^2 - m_4^2)}{2t} + \frac{z_t}{2t} R_t \\ \rightarrow \cos \theta_t = z_t &= \frac{t^2 + t(2s - \sum) + (m_1^2 - m_3^2)(m_2^2 - m_4^2)}{\sqrt{[t - (m_1 + m_3)^2][t - m_1 - m_3]^2 [t - (m_2 + m_4)^2][t - (m_2 - m_4)^2]}} \end{aligned}$$

(où $\sum = \sum_{i=1}^4 m_i^2$ et R_t est le radical du dénominateur de la deuxième relation)

$$M_t(s, t) \rightarrow M_t(z_t, t)$$

$$(2) M_t(z_t, t) = \sum_l (2l+1) M_l(t) P_l(z_t)$$

dans un domaine entourant $[-1, +1]$, limité par les singularités provenant de $t (t > t_0)$.

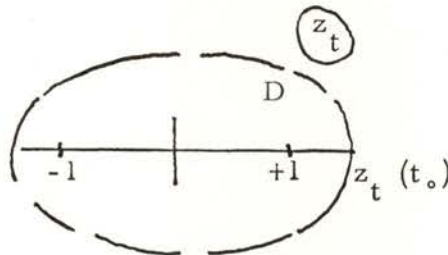


Figure 10

(2) peut se transformer en :

$$(3) M_t(z_t, t) = - \frac{1}{2i} \int_{c_0} (2l+1) M(l, t) \frac{P_l(-z_t)}{\sin \pi l} dl$$

Après déformation du contour, la relation peut être étendue en dehors du domaine D de z_t , ce qui permet de passer dans la voie s

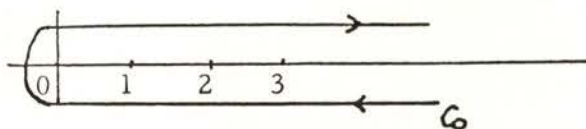


Figure 11

($t < 0, s > s_0$; notamment si $t \neq 0$ et $s \rightarrow +\infty, z_t \rightarrow -\infty$).

On aboutit alors à une relation donnant $M_s(s, t)$ en fonction des pôles en l de $M(l, t)$

$$M(l, t) \simeq \frac{\beta_i(t)}{l - \alpha_i(t)} \text{ pour } l \text{ proche de } \alpha_i(t)$$

$\alpha_i(t) \rightarrow$ trajectoires de Regge (qui avait introduit ce concept en diffusion potentielle).

On obtient ainsi pour les grandes valeurs de s :

$$(4) \quad M_s(s, t) \simeq \sum_i [2\alpha_i(t) + 1] \frac{b_i(t)}{\sin \pi \alpha_i(t)} \left(\frac{s}{s_1}\right)^{\alpha_i(t)}$$

où :

$$b_i \equiv \sqrt{\pi} \beta_i \left(\frac{-4t}{R_t}\right)^{\alpha_i(t)} s_1^{\alpha_i(t)} \frac{\Gamma\left[\alpha_i(t) + \frac{1}{2}\right]}{\Gamma[\alpha_i(t) + 1]}$$

(s_1 facteur d'échelle $\simeq 1 \text{ GeV}^2$).

En fait, il y a lieu de séparer les parties paire et impaire en z_t de $M(z_t, t)$, soit $M^\tau(z_t, t)$ ($\tau = \pm 1$) et les $\alpha_i^\tau(t)$, $b_i^\tau(t)$ sont différents dans les deux cas. Il s'introduit alors en plus dans (4) le «facteur de signature» : $\frac{1}{2} \left[1 + \tau e^{-i\pi \alpha_i^\tau(t)} \right]$.

Revenant à $t > 0$, ces trajectoires donnent l en fonction de t aux points d'ordonnée entière.

Sur une même trajectoire de Regge, on doit trouver des particules de mêmes nombres quantiques internes, de même parité P , et de même signature τ , concept qui s'introduit ici.

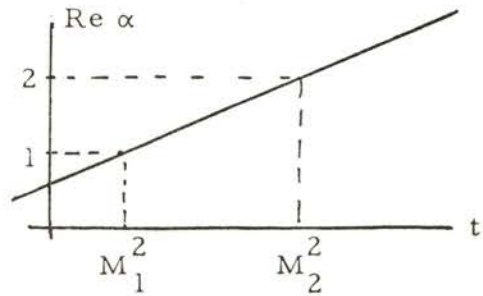
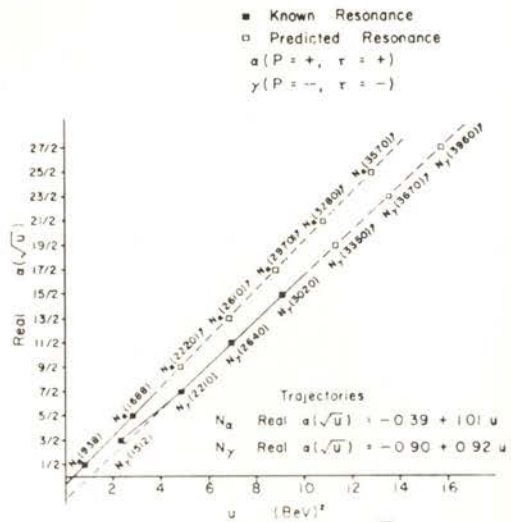
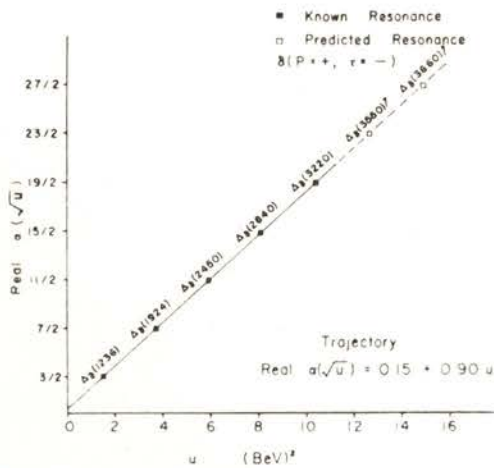


Figure 12

Pour les Bosons (mésons) $\begin{cases} \tau = + & \text{pour } J \text{ pairs} \\ \tau = - & \text{pour } J \text{ impairs} \end{cases}$

I = 3/2, Y = +1 Regge Recurrences



Chew-Frautschi diagram for baryon trajectories supporting linearity of trajectories with W^2 (14)

Figure 13

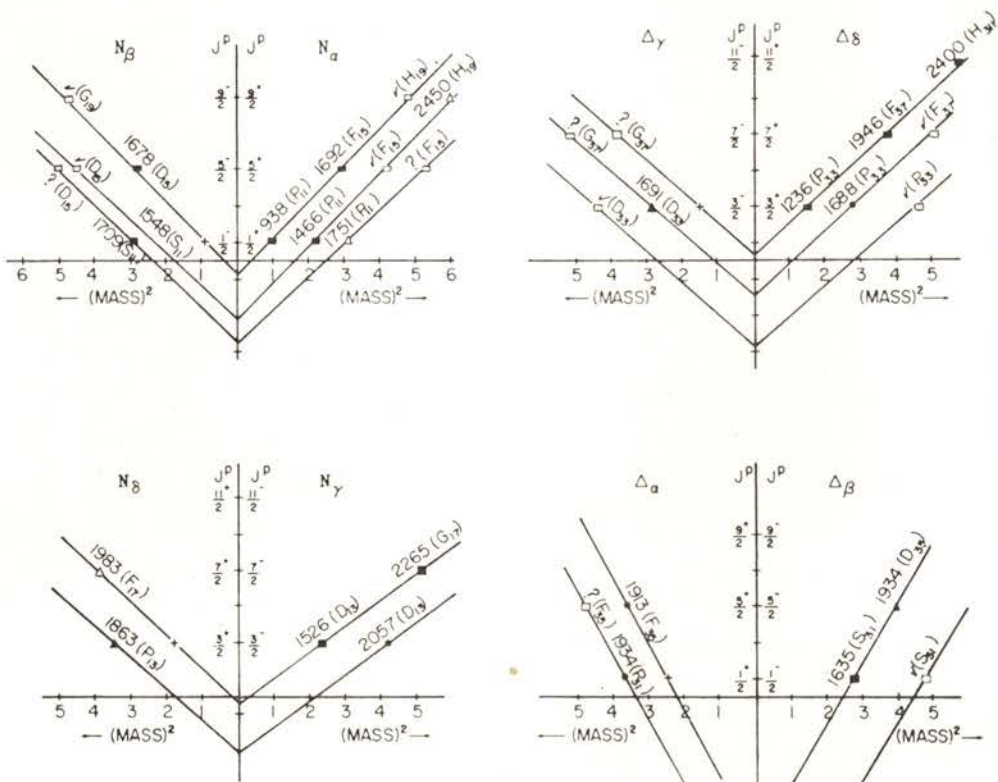


Fig. 7. Proposed classification of πN resonances on MacDowell-symmetric Regge trajectories. The notation for the resonances is (■) established, (●) probable, (▲) interpretation in doubt, (Δ) unconfirmed, (∇) indication of increasing absorption in partial wave, (□) predicted, (+) extinguished state, (?) no information available (Ref. [79]).

Figure 14

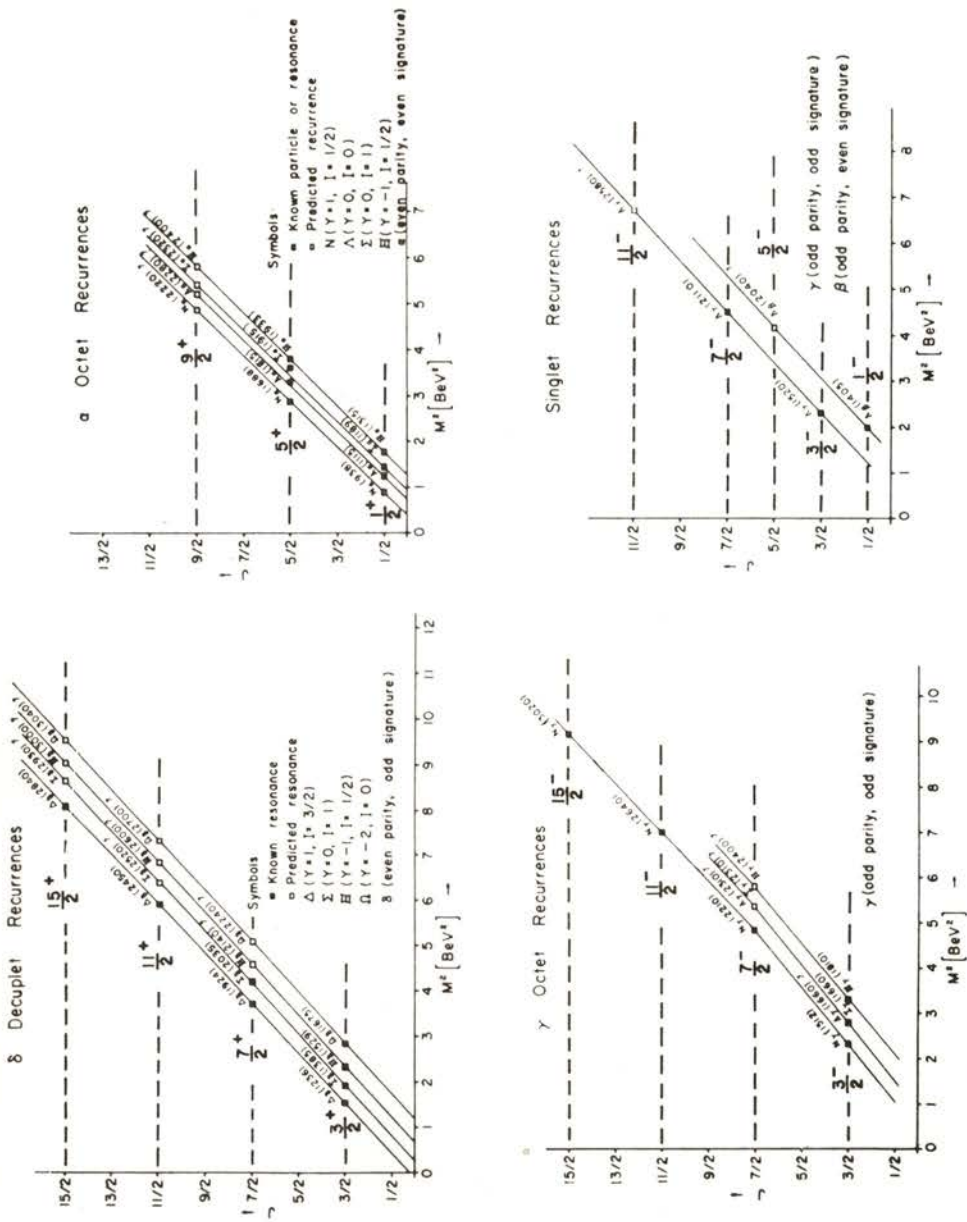


Fig. 8. Evidence and predictions for $SU(3)$ symmetric baryon trajectories (Ref. [77]).

Figure 15

Figure extraite de Gerald E. HITE — Recent developments of Regge pole model — R. M. P. 1969, 41, 669.

$$\text{Pour les Fermions (baryons)} \left\{ \begin{array}{l} \tau = + \quad \text{pour } J = \frac{1}{2} \text{ pair} \\ \tau = - \quad \text{pour } J = \frac{1}{2} \text{ impair} \end{array} \right.$$

Trajectoires que l'on dénomme souvent :

- $\alpha \quad P = + \quad , \quad \tau = +$
- $\beta \quad P = - \quad , \quad \tau = +$
- $\gamma \quad P = - \quad , \quad \tau = -$
- $\delta \quad P = + \quad , \quad \tau = -$

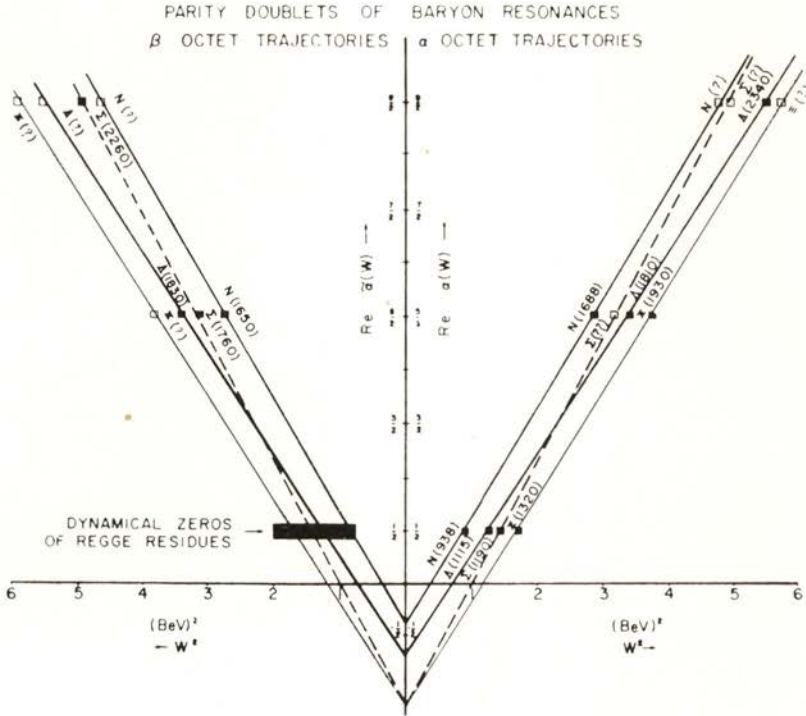


Fig. 9. An assignment of baryon resonances to MacDowell parity doublets $SU(3)$ symmetric trajectories

Figure 16

Figure extraite de Gerald E. HITE — Recent developments of Regge pole model — R. M. P. 1969, 41. 669.

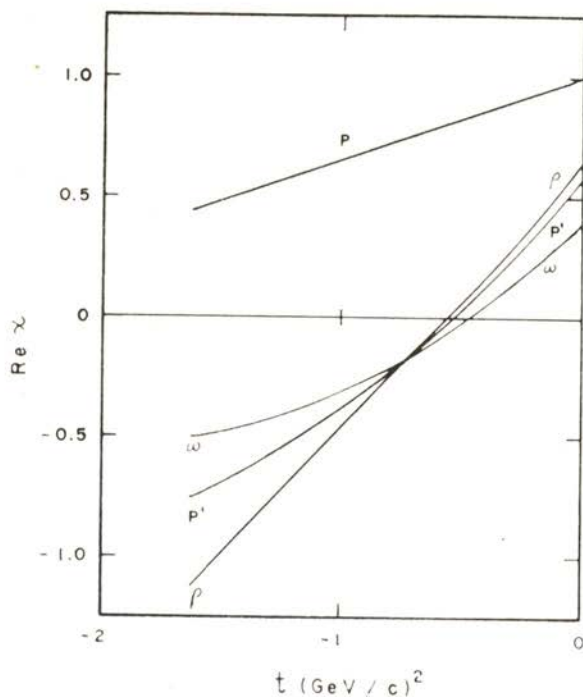


Fig. 10. Typical example of trajectories found in fitting experimental data
Figure 17

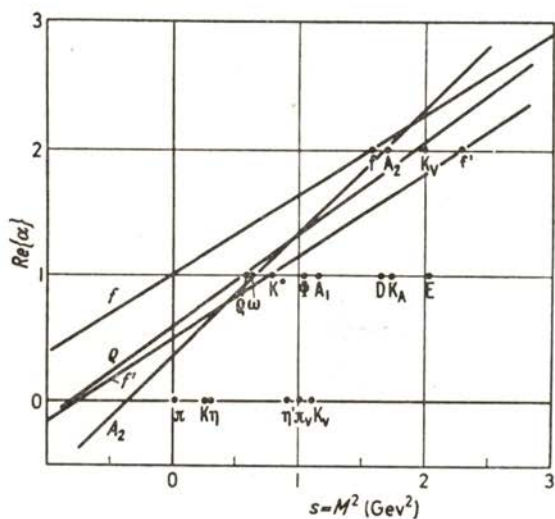


Fig. VIII.1. A Chew-Frautschi plot for the mesons. The particle masses are taken from Rosenfeld et al., 1967, and trajectories have been drawn for those cases in which α (o) in know from table (VIII.1)

Figure 18

Figure extraite de P. D. B. COLLINS et E. J. Squires — Regge poles in Particle Physics
Springer-Verlag 1968.

Cette prévision a été remarquablement vérifiée, avec des trajectoires pratiquement linéaires et parallèles.

Nous donnons celles des baryons, puis des mésons. Celles des baryons montrent une propriété à peu près prévue théoriquement (symétrie de Mac Dowell): mêmes trajectoires pour même τ , et P opposés.

Les deux ensembles d'idées que nous avons évoqués sont en principe disjoints. Tant qu'on les applique de manière assez générale, ils peuvent coexister (SU_3 et diagramme de Chew-Frautschi).

Si on précise le modèle des quarks, ils n'aboutissent pas forcément aux mêmes prévisions, pour les positions des masses des résonances.

*A/ RESONANCES BARYONIQUES
ET MODELES DE QUARKS*

Nous devons d'abord nous demander si les Baryons connus se classent bien en multiplets de SU_3 , et nous allons voir que cela semble assez bien vérifié; évidemment, on a beaucoup de multiplets de spins et parités différents, et cela rend indispensable une nouvelle classification, que l'on espère trouver avec le modèle de quarks non Relativistes.

Harari dans son rapport à la Conférence de Vienne (1968) propose des regroupements des résonances baryoniques en octets et décuplets. Toutes les résonances d'un même multiplet doivent avoir même J^P ; de plus leurs masses doivent vérifier les formules de masse :

— masses équidistantes pour Δ , Σ , Ξ , Ω dans le décuplet.

— masses satisfaisant à la formule d'Okubo-Gell-Mann dans l'octet, formule à trois constantes :

$$(1) \quad M = M_0 + M_1 Y + M_2 \left[I(I+1) - \frac{Y^2}{4} \right]$$

d'où résulte la relation :

$$M_N + M_{\Xi} = \frac{3}{2} M_{\Lambda} + \frac{1}{2} M_{\Sigma}$$

pour les 4 multiplets d'isospin qui y sont contenus.

En fait, Harari n'utilise pas ces relations, mais une recette empirique: les membres $S = -1$ de chaque multiplet se trouveraient

environ 100 à 200 *Me V* au dessus des états non étranges. Autrement dit, dans les décuplets, il prend bien la formule linéaire :

$$(2) \quad M \simeq M_0 - b Y$$

mais avec le même *b* pour tous les décuplets; dans les octets, il prend encore la même formule approchée, négligeant dans (1) le 3^{ème} terme, et prenant $M_1 = -b$. Il donne de cette règle les justifications suivantes :

- 1/ Elle est bien vérifiée dans les multiplets connus,
- 2/ Pour les états de masse élevée, on doit s'attendre à des termes d'ordre supérieur cassant SU_3 , à des mélanges de configuration, pouvant superposer des états de plusieurs multiplets, qui rendent très douteuses les formules de masse exactes.

Il porte dans les diagrammes les masses observées pour des états *N*, Λ , Σ par exemple en fonction de J^P (états $S_{1/2}$, $P_{1/2}$, etc. ... notés S_1 , P_1 , etc.) en effectuant le décalage indiqué dans l'échelle des

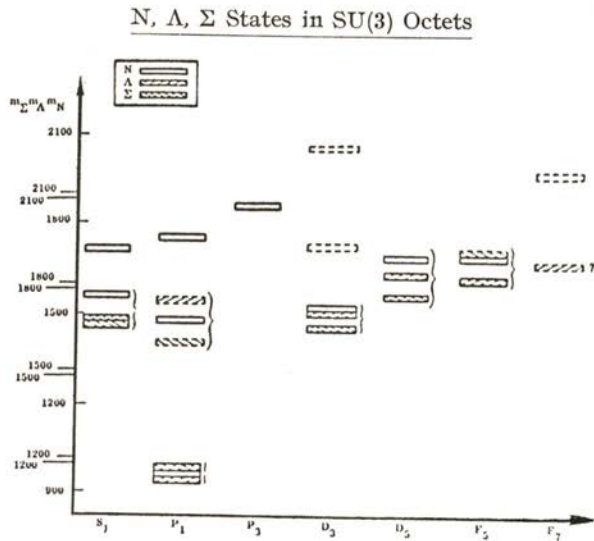


Fig. 9 — *N*, Λ , and Σ excited states assigned to $SU(3)$ octets. The three mass scales are shifted with respect to each other. The «ideal world» in which the *N*- Λ - Σ mass splitting in all octets is identical would correspond to overlapping «boxes» for the corresponding states in a given octet. The solid and dashed boxes are defined in Fig. 5.

Figure 19

Figure extraite de H. Harari — *Resonances-theory* — Proceedings of the 14th International Conference on high energy physics (1968) CERN. Genève 1968

Δ, Σ States in SU(3) Decuplets

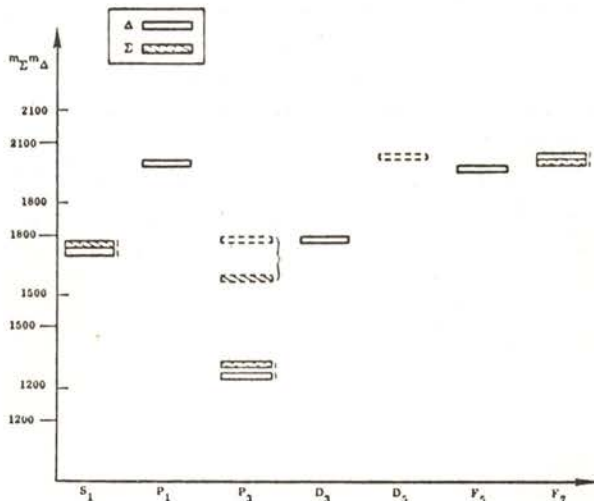


Fig. 10 — Δ and Σ excited states assigned to SU(3) decuplets. Notation as in Fig. 9.

Predicted Ξ States

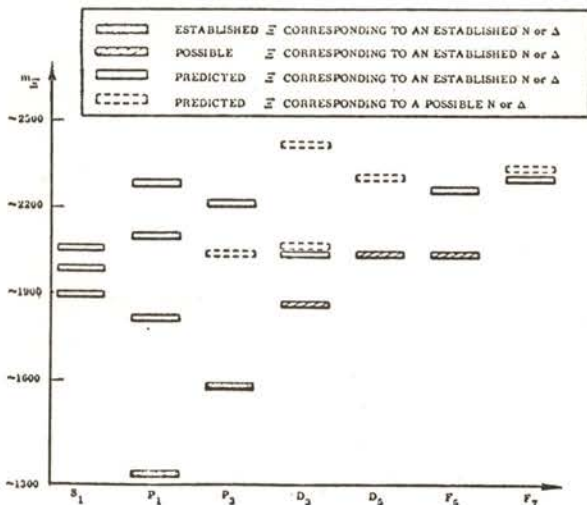


Fig. 11 — The predicted Ξ spectrum. The approximate mass scale is based on adding 300–350 MeV to the mass of the corresponding N or Δ state.

Figures 19

Figures extraites de H. Harari (CERN, Genève 1968)

masses, et admettant une certaine erreur: les rectangles de son diagramme qui se recouvrent, ou sont voisins, sont classés dans le même octet. Il effectue la même opération pour Σ et Δ qu'il répartit ainsi dans des décuplets (Figures 9 et 10 de son rapport); l'ensemble des Ξ est porté sur un diagramme à part (figure 11). Il obtient ainsi les tables 4 (6 octets) et 5 (4 décuplets). De nouveaux états Λ , Σ trouvés récemment s'y placent exactement, dit Harari, mais il a fait un certain choix parmi des résonances encore mal établies. Pour les Ξ , la situation est assez confuse et Harari pense que les résonances Ξ observées sont souvent des superpositions de plusieurs résonances voisines. Ses diagrammes le conduisent à certaines prévisions sur des états. Λ , Σ entre 1850 et 2200 *MeV*.

TABLEAU II

TABLE 4

Possible SU(3) octets. Unconfirmed states or questionable SU(3) assignments are question-marked

J^P	N	Λ	Σ	Ξ
$\frac{1^+}{2}$	940	1115	1190	1320
$\frac{1^+}{2}$	1470	1750?	1610?	—
$\frac{3^-}{2}$	1520	1690	1660	1820?
$\frac{1^-}{2}$	1550	1670	1670?	—
$\frac{5^-}{2}$	1690	1830	1770	1930?
$\frac{5^+}{2}$	1690	1815	1910?	2030?

TABLE 5

Possible SU(3) decuplets. Notation as in Table 4

J^P	Δ	Σ	Ξ	Ω
$\frac{3^+}{2}$	1240	1385	1530	1675
$\frac{1^-}{2}$	1640	1770?	—	—
$\frac{3^+}{2}$	1690?	1660?	—	—
$\frac{7^+}{2}$	1950	2030	—	—

Tableaux extraits de H. Harari — Vienne Conference

Maintenant, il faut essayer de classer tous ces octets et décuplets dans le schéma plus général du modèle des quarks.

Les Baryons ($B = 1$) s'obtiennent de la manière la plus simple comme états à 3 quarks.

On veut placer dans les niveaux les plus bas les états de l'octet et du décuplet «classiques». Dans le décuplet se trouve la Δ_{33} (1236 MeV) qui contient l'état de charge +2: Δ_{33}^{++} . Cet état doit être formé de 3 p ($p_1 p_2 p_3$); il est donc symétrique en spin-unitaire, et comme $J^P = \frac{3^+}{2}$, il doit être symétrique en spin ⁽¹⁾, si l'on admet

pour ce niveau bas $L = 0$. Si les quarks sont bien des *Fermions*, il faut donc que ce soit un état antisymétrique d'espace de $L = 0$.

1^o) Dans la première version du modèle des quarks, on postule alors que tous les niveaux les plus bas correspondent à $L = 0$ antisymétrique d'espace.

Avec les couches d'un potentiel moyen, ceci n'est pas réalisé facilement: on ne peut prendre les 3 quarks sur des orbitales s , car ceci donnerait un état global s^3 symétrique. En les prenant sur des orbitales p , ceci serait réalisable avec l'état de fonction d'onde

$\psi \propto \vec{r}_1 \cdot (\vec{r}_2 \wedge \vec{r}_3)$, mais cet état disparaît si l'origine est le c. m. ($\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3 = 0$): c'est un état *spurieux* (d'ailleurs il aurait la parité —) Il faut donc introduire des états plus compliqués par exemple d^3 ou $s^2 d^1$.

Quoiqu'il en soit, montrons que l'on obtient bien ainsi tous les états du décuplet et de l'octet (Tableau II).

Dans le cas simple ci-dessus avec 3 quarks identiques (qui peuvent être remplacés par $n_1 n_2 n_3 = \Delta_{33}^-$ ou $\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = \Omega^-$) la fonction d'onde de spin unitaire est complètement symétrique, obtenue par le symétriseur $\boxed{1 \mid 2 \mid 3}$; il en est de même pour la fonction d'onde de spin.

En dehors de ce cas, on va rencontrer des systèmes à :

- a) 2 quarks identiques + 1 troisième
- b) 3 quarks différents

avec des propriétés de symétrie un peu plus compliquées.

(1) En prenant les 3 spins parallèles on a le sous-état magnétique $M = \frac{3}{2}$ ou $M = -\frac{3}{2}$; en symétrisant $p_1^+ p_2^+ p_3^+$ avec toutes les possibilités de spins on obtient tous les M de $J^P = \frac{3^+}{2}$.

— Dans le cas (a), on peut soit symétriser complètement comme ci-dessus en spin unitaire et spin :

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \times \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \rightarrow J^P = \frac{3^+}{2}$$

spin unitaire spin

état du décuplet qui pourra avoir :

$$I = 1, \quad I_3 = \pm 1 \quad \text{si } p_1 p_2 \lambda_3, \quad n_1 n_2 \lambda_3$$

$$S = -1 \quad (\Sigma^*)^+ \quad (\Sigma^*)^-$$

ou :

$$I = \frac{1}{2}, \quad I_3 = \pm \frac{1}{2} \quad \text{si } p_1 \lambda_2 \lambda_3, \quad n_1 \lambda_2 \lambda_3$$

$$S = -2 \quad (\Xi^*)^0 \quad (\Xi^*)^-$$

Ou bien symétriser sur 2 particules seulement (12)

antisymétriser sur 2 autres (1,3) suivant

1	2
3	

 par exemple,

en spin unitaire et spin. On a alors les états: $J^P = \frac{1^+}{2}$ de l'octet, avec les diverses possibilités d'isospin indiquées au tableau III.

On ne peut aller plus loin, antisymétrisant sur les 3, puisqu'il n'y a que 2 états de spin.

— Dans le cas (b) les états $p n \lambda$ sont de charge nulle.

— En symétrisant complètement on obtient un $J^P = \frac{3^+}{2}$ de $I = 1$ qui est: $(\Sigma^*)^0$.

— En symétrisant sur 2 particules comme ci-dessus, on a des états $J^P = \frac{1^+}{2}$ au nombre de deux (puisque symétrisant sur $p n$ on a $I = 1$, antisymétrisant $I = 0$).

Ce sont $\Sigma^0 (I = 1)$, $\Lambda^0 (I = 0)$.

Compte tenu des états de spin, il y a :

$$\begin{array}{r}
 4 \times 10 = 40 \text{ états dans le décuplet} \\
 2 \times 8 = 16 \text{ états dans l'octet} \\
 \hline
 56
 \end{array}$$

La représentation 56 est bien la première qui apparaît dans la combinaison de trois sextets de SU_6 : $6 \otimes 6 \otimes 6$, et qui soit symétrique. La classification ci-dessus ne contient rien de plus tant que l'on n'introduit pas de forces résiduelles entre quarks, qui n'ont pas l'invariance SU_6 , et qui permettent de lever la dégénérescence des niveaux de ce multiplet 56, donc de donner leurs différences d'énergie.

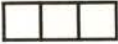







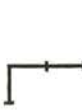








Par ailleurs, si l'on précise la forme du puits de potentiel moyen, on pourra obtenir des multiplets de masse de plus en plus élevées, en plaçant les quarks sur des orbitales de plus en plus excitées. Des calculs des deux types ont été effectués, en analogie avec les calculs nucléaires (Morpurgo, Dalitz).

2°) LA SECONDE VERSION DU MODÈLE DES QUARKS

Cette analogie avec la nucléaire est loin d'être complète, puisque, dans le noyau, on commence par remplir des états $s \rightarrow$ fonction d'onde d'espace symétrique.

Certains auteurs ont critiqué aussi le choix d'une fonction anti-symétrique parce que le recouvrement des orbitales y est minimal. L'état ne peut être alors le plus stable que s'il y a des forces d'échange (de type Majorana) répulsives, contrairement à celles que l'on connaît dans le noyau. Cependant, compte tenu du succès de la classification ci-dessus pour octet et décuplet les moins lourds, on ne peut prendre une fonction d'onde symétrique que dans l'hypothèse où les quarks obéissent à la statistique de Bose. Ceci devient possible avec les parastatistiques introduites par Feshbach, et l'idée a été exploitée par Greenberg et Messiah qui ont proposé de considérer les quarks comme des «*para-Fermions d'ordre 3*». Greenberg (Phys. Rev. Letters 13, 600 (1964)) a développé les premiers calculs dans ce modèle; il y remplit et combine les orbitales successives de manière que la fonction d'onde totale soit symétrique; il donne la symétrie de l'ensemble spin unitaire-spin : les multiplets de SU_3 et les valeurs de J contenues sont indiqués. Nous ne donnons pas ce tableau global qui contient en tout

TABLEAU III

Système	Q	S	I_3	I	J^P	Particule	Symétrie	
$p_1 p_2 p_3$	+2	0	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	Δ_{33}^{++}		
$p_1 p_2 n_3$	+1	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	Δ_{33}^+	 (1)	
				$\frac{1^+}{2}$	$\frac{1^+}{2}$	P		
$p_1 p_2 \lambda_3$	+1	-1	1	1	$\frac{3^+}{2}$	$(\Sigma^*)^+$	 (2)	
				1	$\frac{1^+}{2}$	Σ^+		
$p_1 n_2 n_3$	0	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	Δ_{33}^0	 (2)	
				$\frac{1^+}{2}$	$\frac{1^+}{2}$	N		
$p_1 n_2 \lambda_3$	0	-1	0	1	$\frac{3^+}{2}$	$(\Sigma^*)^0$	 (2)	
				1	$\frac{1^+}{2}$	Σ^0		
				0	$\frac{1^+}{2}$	Λ^0		
$p_1 \lambda_2 \lambda_3$	0	-2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	$(\Xi^*)^0$	 (2)	
				$\frac{1}{2}$	$\frac{1^+}{2}$	Ξ^0		
$n_1 n_2 n_3$	-1	0	$-\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	Δ_{33}^-		
$n_1 n_2 \lambda_3$	-1	-1	-1	1	$\frac{3^+}{2}$	$(\Sigma^*)^-$	 (2)	
				1	$\frac{1^+}{2}$	Σ^-		
$n_1 \lambda_2 \lambda_3$	-1	-2	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	$(\Xi^*)^-$	 (2)	
				$\frac{1}{2}$	$\frac{1^+}{2}$	Ξ^-		
$\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3$	-1	-3	0	0	$\frac{3^+}{2}$	Ω^-		

(1) Schématiser le 1^{er} diagramme d'Young. (2) Schématiser le 3^{ème} diagramme d'Young.

TABLEAU IV

Partial wave	J^P	Mass (Me V)	M^2 (GeV ²)	Γ (Me V)	CLASSIFICATION		S
					(SU(6), L ^P)	SU(3)	
P_{11}	$\frac{1^+}{2}$	940	0.88	0	(56,0 ⁺)	8	$\frac{1}{2}$
P_{11}	$\frac{1^+}{2}$	1460	2.13	260	?	8	?
D_{13}	$\frac{3^-}{2}$	1515	2.30	115	(70,1 ⁻)	8	$\frac{1}{2}$
S_{11}	$\frac{1^-}{2}$	1525	2.33	80	(70,1)	8	$\frac{1}{2}$
D_{15}	$\frac{5^-}{2}$	1675	2.81	145	(70,1 ⁻)	8	$\frac{3}{2}$
F_{15}	$\frac{5^+}{2}$	1690	2.86	125	(56,2 ⁺)	8	$\frac{1}{2}$
S_{11}	$\frac{1^-}{2}$	1715	2.94	280	(70,1 ⁻)	8	$\frac{3}{2}$
D_{13}	$\frac{3^-}{2}$	1755	3.08	?	(70,1)	8	$\frac{3}{2}$
P_{11}	$\frac{1^+}{2}$	1785	3.18	405	?	8	?
? P_{13}	$\frac{3^+}{2}$	1900	3.60	335	?	8	?
? F_{17}	$\frac{7^+}{2}$	~ 2000	~ 4.00	225	(56,4 ⁺)	8	$\frac{1}{2}$
? D_{13}	$\frac{3^-}{2}$	~ 2000	~ 4.00	290	(70,3 ⁻)	8	$\frac{1}{2}$
G_{17}	$\frac{7^-}{2}$	2190	4.80	300	(70,3 ⁻)	8	$\frac{3}{2}$
	$\frac{13^-}{2}$?	2650	7.02	360	(70,5 ⁻)	8	$\frac{3}{2}$
	$\frac{17^-}{2}$?	3030	9.18	400	(70,7 ⁻)	8	$\frac{3}{2}$
	$\frac{25^-}{2}$?	3690	13.6	?	(70,11 ⁻)	8	$\frac{3}{2}$

N resonances. From Ref. 66 and 68. ? before partial wave symbol means doubtful existence. ? after J^P means doubtful J^P

Table 8

Tableau extrait du rapport de Greenberg à la Conférence de Lund (1969)

TABLEAU V

Partial wave	J^P	Mass (MeV)	M^2 (GeV ²)	Γ (MeV)	CLASSIFICATION		S
					(SU(6), L ^P)	SU(3)	
P_{33}	$\frac{3^+}{2}$	1240	1.54	120	(56,0 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$
S_{31}	$\frac{1^-}{2}$	1630	2.66	160	(70,1 ⁻)	10	$\frac{1}{2}$
D_{33}	$\frac{3^-}{2}$	1670	2.79	225	(70,1 ⁻)	10	$\frac{1}{2}$
? P_{33}	$\frac{3^+}{2}$	1690	2.85	280	?	10	?
F_{35}	$\frac{5^+}{2}$	1880	3.53	250	(56,2 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$
P_{31}	$\frac{1^+}{2}$	1905	3.63	300	(56,2 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$
F_{37}	$\frac{7^+}{2}$	1940	3.76	210	(56,2 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$
? D_{35}	$\frac{5^-}{2}$	1950	3.80	310	?	10	?
? P_{33}	$\frac{3^+}{2}$	2000	4.00	290	(56,2 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$
	$\frac{11^+}{2}$?	2420	5.86	310	(56,4 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$
	$\frac{15^+}{2}$?	2850	8.12	400	(56,6 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$
	$\frac{19^+}{2}$?	3230	10.4	400	(56,8 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$

Δ resonances. From Ref. 66 and 68. ? before partial wave symbol means doubtful existence. ? after J^P means doubtful J^P

Table 9

Tableau extrait du rapport de Greenberg à Lund.

TABLEAU VI

Partial wave	J^P	Masse (Me V)	M^2 (GeV ²)	CLASSIFICATION		S
				(SU(6), L^P)	SU(3)	
P_{01}	$\frac{1^+}{2}$	1115	1.24	(56,0 ⁺)	8	$\frac{1}{2}$
?	?	1327	1.76	?	?	?
S_{01}	$\frac{1^-}{2}$	1405	1.97	(70,1 ⁻)	1	$\frac{1}{2}$
D_{03}	$\frac{3^-}{2}$	1520	2.31	(70,1 ⁻)	1	$\frac{1}{2}$
S_{01}	$\frac{1^-}{2}$	1670	2.79	(70,1)	8	$\frac{1}{2}$
? P_{01}	$\frac{1^+}{2}$	~ 1670	~ 2.79			
D_{03}	$\frac{3^-}{2}$	1690	2.86	(70,1)	8	$\frac{1}{2}$
?? S_{01}	$\frac{1^-}{2}$	1750	3.06	(70,1 ⁻)	8	$\frac{3}{2}$
? P_{01}	$\frac{1^+}{2}$	~ 1800	~ 3.24			
F_{05}	$\frac{5^+}{2}$	1820	3.31	(56,2 ⁺)	8	$\frac{1}{2}$
D_{05}	$\frac{5^-}{2}$	1830	3.35	(70,1 ⁻)	8	$\frac{3}{2}$
? P_{03}	$\frac{3^+}{2}$	1860	3.46	(56,2 ⁺)	8	$\frac{1}{2}$
? F_{07}	$\frac{7^+}{2}$	2015	4.06	?	?	?
? D_{03}	$\frac{3^-}{2}$	2020	4.08	?	?	?
G_{07}	$\frac{7^-}{2}$	2100	4.41	(70,3 ⁻)	1	$\frac{1}{2}$
? H_{09}	$\frac{9^+}{2}$	2350	5.52	(56,4 ⁺)	8	$\frac{1}{2}$

Λ resonances. From Ref. 67 and 68. ? (??) before partial wave symbol means doubtful (unlikely) existence

Table 10

Tableau extrait du rapport de Greenberg à Lund.

TABLEAU VII

Partial wave	J^P	Mass (Me V)	M^2 (GeV ²)	CLASSIFICATION		S
				(SU(6), L ^P)	SU(3)	
P_{11}	$\frac{1^+}{2}$	1190	1.42	(56,0 ⁺)	8	$\frac{1}{2}$
P_{13}	$\frac{3^+}{2}$	1385	1.92	(56,0 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$
?	?	1480	2.19	?	?	?
? P_{11}	$\frac{1^+}{2}$	1560	2.43	?	8	?
	$\frac{1^-}{2}$?	1616	2.61	(70,1 ⁻)	8	$\frac{1}{2}$
D_{13}	$\frac{3^-}{2}$	1660	2.76	(70,1 ⁻)	8	$\frac{1}{2}$
	$\frac{1^-}{2}$?	1690	2.85	(70,1 ⁻)	8	$\frac{3}{2}$
D_{15}	$\frac{5^-}{2}$	1760	3.10	(70,1 ⁻)	8	$\frac{3}{2}$
S_{11}	$\frac{1^-}{2}$	~ 1760	~ 3.10	(70,1 ⁻)	10	$\frac{1}{2}$
? F_{15}	$\frac{5^+}{2}$	1915	3.66	(56,2 ⁺)	8	$\frac{1}{2}$?
? D_{13}	$\frac{3^-}{2}$	1920	3.69			
F_{17}	$\frac{7^+}{2}$	2030	4.12	(56,2 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$
? G_{17}	$\frac{7^-}{2}$	2130	4.54			
?	$\frac{9^-}{2}$?	2250	5.06	(70,3 ⁻)	8	$\frac{3}{2}$
?	$\frac{9^+}{2}$?	2450	6.00	(56,4 ⁺)	8	$\frac{1}{2}$
?	$\frac{11^+}{2}$?	2600	6.76	(56,4 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$
?	$\frac{15^+}{2}$?	3000	9.0	(56,6 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$

Σ resonances. From Ref. 67 and 68. ? (??) before partial wave symbol means doubtful (unlikely) existence

Table 11

Tableau extrait du rapport de Greenberg à Lund.

TABLEAU VIII

I	J^P	Mass ($Me V$)	M^2 ($Ge V$)	CLASSIFICATION		S
				($SU(6), L^P$)	$SU(3)$	
$\frac{1}{2}$	$\frac{1^+}{2}$	1320	1.74	(56,0 ⁺)	8	$\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	1530	2.34	(56,0 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$
? ?	?	1635	2.67	?	?	?
$\frac{1}{2}$	$\frac{3^-}{2}$?	1820	3.30	(70,1 ⁻) ?	8 ?	$\frac{3}{2}$?
$\frac{1}{2}$?	$\frac{5^-}{2}$?	1930	3.72	(70,1 ⁻) ?	8 ?	$\frac{3}{2}$?
$\frac{1}{2}$?	$\frac{5^+}{2}$?	2030	4.12	(56,2 ⁺) ?	8 ?	$\frac{1}{2}$?
? ?	$\frac{7^+}{2}$?	2250	5.07	(56,2 ⁺)	10	$\frac{3}{2}$
$\frac{1}{2}$		2430	5.90			
?	$\frac{9^-}{2}$?	2500	6.25	(70,3 ⁻)	8	$\frac{3}{2}$

Ξ resonances. From Ref. 67. ? before isospin means doubtful existence.
? after J^P means doubtful J^P

Table 12

Tableau extrait du rapport de Greenberg à Lund.

2 600 états, mais les tableaux que Greenberg a donnés dans son rapport à la Conférence de Lund (1969) : Tableaux VI à VIII.

On notera que le modèle des para-quarks peut être remplacé par un modèle dont les constituants sont trois triplets à charge entière (Han et Nambu). Par ailleurs, les conditions de production et de détection de para-quarks seraient les mêmes que celle des quark (règles de sélection, etc. ...) d'après Greenberg.

CONCLUSION

De cet examen des résonances baryoniques, on peut tirer une conclusion assez optimiste sur leur classement en multiplets de SU_3 , mais avec des complications probables en ce qui concerne les niveaux élevés (mélanges de configuration, etc.).

Ces complications, et le classement d'ensemble des multiplets, ne pourront être compris qu'avec un modèle dynamique plus détaillé. On peut être modérément optimiste sur les possibilités du modèle des quarks à ce sujet.

Il faut noter que ce modèle à 3 quarks ne peut pas donner de résonances baryoniques «exotiques» comme on en rencontre dans les représentations 27 ($I = \frac{5}{2}$ avec $S = -1$) et $\overline{10}$ de SU_3 ($S = +1$).

Celles-ci ne peuvent être obtenues qu'avec un système de 4 quarks et 1 antiquark. Expérimentalement, aucune n'a été observée avec certitude.

Mais ceci pose un autre problème: *pourquoi juste 3 quarks*? On a beau imaginer des forces d'échange, on n'en trouve aucune qui conduise à une saturation juste pour 3. D'ailleurs, on pourrait aussi avoir une non-saturation: pourquoi pas de quarks isolés? ni de systèmes à 2 quarks? Toutes les recherches de charges fractionnaires dans le sol, l'air ou les océans ont donné jusqu'ici un résultat négatif.

B/ RESONANCES MESONIQUES

1^o) Les mésons peuvent être formés à l'aide d'un quark et d'un anti-quark. Le fait que $B = 0$ permet de les classer en multiplets de U_3 plutôt que de SU_3 , c'est à dire en nonets. Si l'on suppose que les quarks sont des para-Fermions d'ordre 3 on peut de la même manière former un Boson avec un quark et un antiquark. Il n'y a donc pas de différence entre la première et la deuxième version du modèle des quarks dès lors qu'on admet que tous les mésons sont des Bosons, ce qui paraît établi expérimentalement par les règles de sélection dans leurs désintégrations.

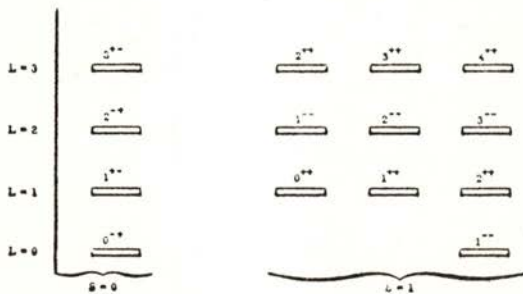


Fig. 2 — $L \leq 3$ $q\bar{q}$ «energy levels». Every level is denoted by J^{PC} and represents an $SU(3)$ nonet. L - S coupling, spin dependence, and $SU(3)$ breaking effects are ignored.

Figure 20

Harari donne, dans la fig. 20, la séquence des niveaux attendue jusqu'à $L \leq 3$. On néglige toujours les interactions spin-orbite (cadre de SU_6). Les niveaux d'excitation radiale ne sont pas donnés. Chaque nonet est caractérisé par J^{PC} où C est la parité de charge des états neutres. On sait que

$$C = (-1)^{L+S}$$

pour un système Fermion, anti-Fermion, tandis que :

$$P = \underline{(-1)^{L+1}}$$

ces deux particules ayant des parités intrinsèques opposées.

Dans le Tableau IX de Greenberg sont donnés les états S et P prévus, identifiés à des résonances observées; 3 cases (états de $I=0$) restent vides. Sur chaque ligne des tableaux figurent 36 états compte tenu des multiplicités de spin, et ceci correspond à la représentation irréductible $36 (6 \otimes \bar{6})$ de U_6 .

Nous ne rappelons pas ici les mélanges de configuration admis entre états $I=0$, les particules physiques (η et χ^0 ; ω et φ) correspondant à des mélanges différents des états théoriques.

REMARQUE

En ce qui concerne la nomenclature des résonances utilisée dans ces tableaux, elle est moins systématique que celle des baryons dans le paragraphe précédent: on y emploie tantôt des noms donnés par les expérimentateurs (δ , ε ou σ , B , etc.), tantôt la nomenclature systématique de Gell-Mann:

$$K^* \text{ (énergie) pour un Boson de } \begin{cases} I = \frac{1}{2} \\ Y = +1 \end{cases}$$

(ainsi le K^* (1260) est aussi appelé C par les expérimentateurs).

Pour les baryons, on avait toujours:

$$\begin{array}{llll} N^* & \text{pour } I = \frac{1}{2}, & \text{étrangereté} & 0 \\ \Sigma^* & \text{» } I = 1, & \text{»} & -1 \\ \Lambda^* & \text{» } I = 0, & \text{»} & -1 \\ \Xi^* & \text{» } I = \frac{1}{2}, & \text{»} & -2 \\ \Delta^* & \text{» } I = \frac{3}{2}, & \text{»} & 0 \end{array}$$

$L = 0$ MESONS

	J^{PC}	$I = \frac{1}{2}$	$I = 1$	$I = 0$	$I = 0$
3S_1	1^{--}	K^* (890)	ρ (765)	ω (780)	ϕ (1020)
1S_0	0^{-+}	K (495)	π (140)	η (550)	η' (960) $\equiv X^0$

$L = 1$ MESONS

	J^{PC}	$I = \frac{1}{2}$	$I = 1$	$I = 0$	$I = 0$
3P_2	2^{++}	K^* (1420)	A_{2H} (1310)	f (1260)	f^* (1515)
3P_1	1^{++}	K^* (1260)	A_1 (1070)	D (1280)	
3P_0	0^{++}	K^π (1100) ?	δ (960)	σ (750) $\equiv \varepsilon$	S^* (1070) ?
1P_1	1^{+-}	K^* (1380)	B (1220)		

Tableau IX

C/ MODELE DES QUARKS ET TRAJECTOIRES DE REGGE

1°) CAS DES MÉSONS

Puisqu'on suppose le quark et l'antiquark non Relativistes, on peut justifier l'existence des trajectoires en appliquant les démonstrations de Regge à l'équation de Schrödinger dans le c. m., qui régit leur état.

On aura :

$$t = (2M + E)^2$$

si E est l'énergie potentielle + cinétique (non relativiste) dans le c. m., et M la masse du quark.

Pratiquement :

$$t \approx 4M^2 + 4ME$$

Dans le cas du potentiel d'oscillateur harmonique souvent utilisé pour sa simplicité :

$$E = -V_0 + \hbar\omega \left[\frac{3}{2} + 2(n-1) + l \right]$$

$\left\{ \begin{array}{l} n \text{ nombre quantique radial comme il est défini en Nucléaire} \\ l \text{ nombre quantique orbital comme il est défini en Nucléaire} \end{array} \right.$

de sorte que l'on trouve bien une relation linéaire entre l et t , comme l'a remarqué Dalitz.

Evidemment ceci peut être pure coïncidence, car toute autre forme de potentiel donne des trajectoires de Regge plus compliquées, avec l réel pour les états liés ($E < 0$), complexe pour les états anti-liés $E > 0$ (en particulier pour les résonances). Il faut remarquer d'ailleurs

qu'on n'observerait pratiquement qu'un petit intervalle de variation de E puisque :

$$\Delta E = \frac{\Delta t}{4M}$$

où M est grand $\geq 3 GeV$, de sorte que la trajectoire linéaire de Chew et Frautschi ne donnerait aucune indication sur $E(l)$ à plus grande échelle.

Maintenant si entrant dans le détail des prévisions, on porte les états du tableau IX sur le diagramme de Chew et Frautschi, on ne voit pas apparaître de nouveaux alignements; de toute manière le diagramme de Chew et Frautschi se dessine plutôt mal pour les mésons.

2°) CAS DES BARYONS

Ici le problème des états N. R. à trois particules avec un potentiel d'interaction quelconque à courte portée est beaucoup plus compliqué que celui à deux particules, et l'on ne peut prédire aucune relation simple entre E et J ; peut être même y a-t-il non seulement des pôles de Regge mais aussi des coupures.

SU_6 donne plutôt un terme additionnel en $J(J+1)$ dans la formule des masses, c'est à dire :

$$t = a + b \left(J + \frac{1}{2} \right)^2$$

C'est d'ailleurs le comportement que l'on attendait aux grandes valeurs de t par exemple, pour un état N^* ou Δ considéré comme une résonance dans la diffusion $\pi-N$ (en accord avec le bootstrap), si l'on admet une portée strictement limitée de l'interaction. Mais on a vu que les trajectoires expérimentales restent linéaires jusqu'à des valeurs assez grandes de M^2 . Avec un puits moyen en forme d'oscillateur et une interaction résiduelle convenable entre les quarks, on pourrait retrouver cette forme.

En entrant dans le détail des prévisions, on obtient un schéma ici encore confus, bien que le diagramme de Chew Frautschi soit jusqu'ici beaucoup plus clair pour les Baryons.

On trouvera les schémas les plus récents de ce type dans le rapport de Greenberg (Conférence de Lund).

D/ CONCLUSION

Alors que l'hypothèse de la symétrie SU_3 ne donnant pas de résultats précis sur les moments angulaires des résonances peut s'accorder avec le diagramme de Chew-Frautschi fondé sur les pôles de Regge, le modèle des quarks, prolongement de SU_3 , mais plus précis, peut conduire à des résultats différents: en ce qui concerne surtout les baryons, un modèle donnant des trajectoires $J(E)$ rectilignes, et de plus toutes parallèles, paraît assez artificiel.

Le problème de la classification des résonances demande encore beaucoup de travaux expérimentaux pour préciser leurs positions et surtout leurs nombres quantiques, et beaucoup d'efforts théoriques, ce problème ne pouvant probablement pas être dissocié de celui des interactions fortes en général.

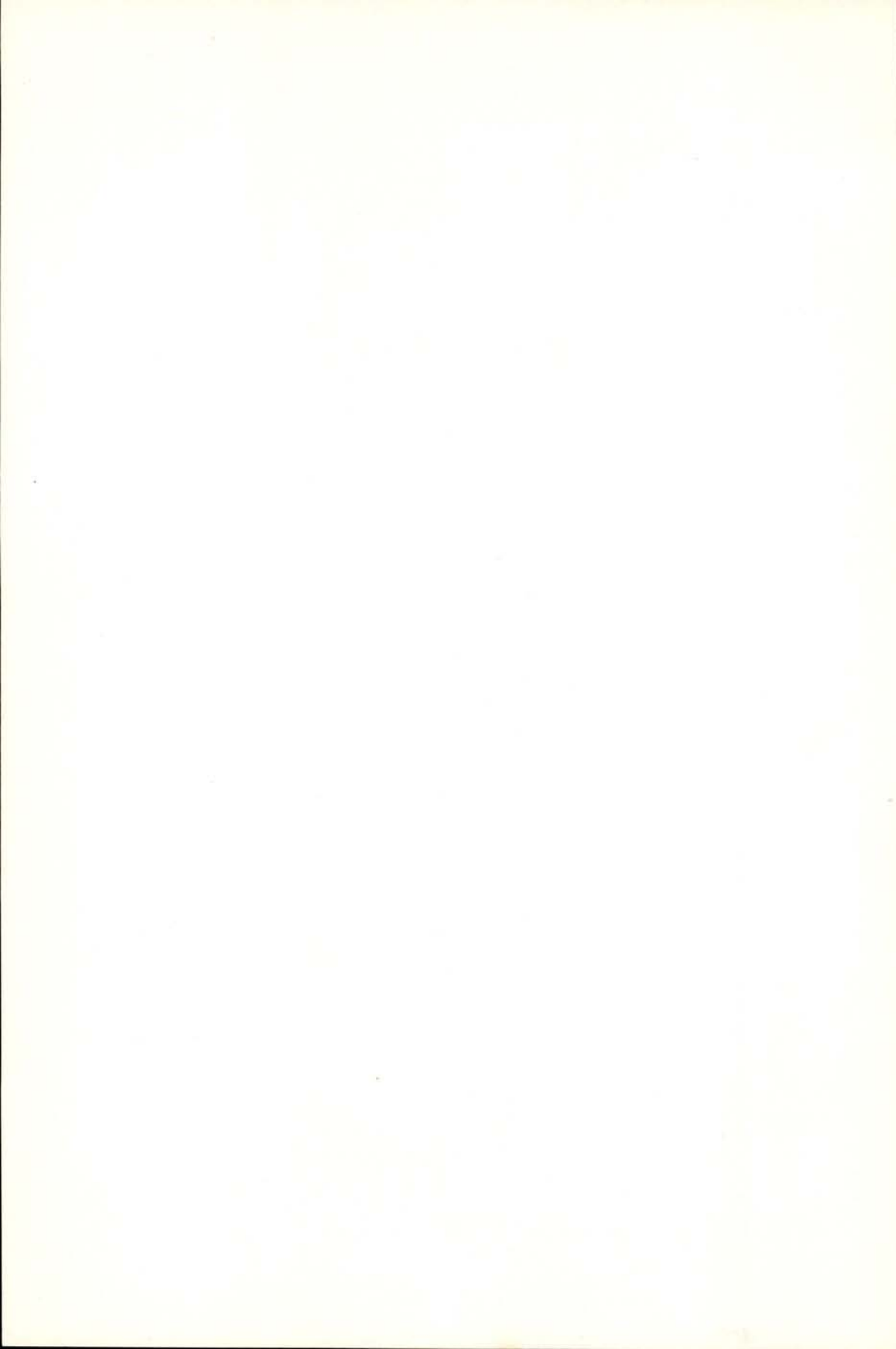


LISTE DES PUBLICATIONS REÇUES ACTUELLEMENT
EN ENCHANGE AVEC PORTUGALIAE PHYSICA

- ALEMANHA — *Physikertagung (Physikalisch-Technische Bundesanstalt)*
— *Physikertagung - Plenarvorträge (Physikalisch-Technische Bundesanstalt)*
— *Physikertagung - Vorabdrucke der Fachberichte (Physikalisch-Technische Bundesanstalt)*
— *Sitzungsberichte der Sächsischen Akademie der Wissenschaften zu Leipzig*
— *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*
- ARGENTINA — *Anales de la Sociedad Científica Argentina*
— *Mathematicae Notae (Boletín del Instituto de Matemática «Beppo Levi»)*
— *Revista de la Unión Matemática Argentina*
- AUSTRÁLIA — *Journal and Proceedings of the Royal Society of New South Wales*
- BÉLGICA — *Annuaire de l'Académie Royale de Belgique*
— *Bulletin de la Classe des Sciences de l'Académie Royale de Belgique*
— *Mededelingen uit het Natuurkundig Laboratorium der Universiteit te Gent*
— *Recueil de Travaux de Laboratoire de Physique de l'Université de Louvain*
— *Scientific Report (Centre d'Etude de l'Energie Nucleaire)*
- BRASIL — *Boletim do Gabinete Português de Leitura de Porto Alegre*
— *Notícia (Centro Latino Americano de Física)*
- BULGÁRIA — *Annuaire de l'Université de Sofia*
- CANADÁ — *Canadian Journal of Physics*
- E. U. A. — *Bulletin of the Scripps Institution of Oceanography (University of California)*
— *Bulletin of the Seismographic (University of California)*
— *Journal of the Franklin Institute*
— *Report of the Publications and Theses (Mass. Institute of Technology)*
— *Research in Materials (Mass. Institute of Technology)*
— *Solid-State and Molecular Theory Group (Mass. Institute of Technology)*
— *The General Radio Experimenter*

- EQUADOR — *Anales de la Universidad Central del Ecuador*
- ESPAÑA — *Revista de Geofísica (Instituto Nacional de Geofísica)*
- FINLANDIA — *Annales Academiae Scientiarum Fennicae*
— *Commentationes Physico-Mathematicae (Societas Scientiarum Fennica)*
- FRANÇA — *Annales de Physique*
— *Bulletin de la Société Scientifique de Bretagne*
— *Bulletin de la Société Scientifique de Bretagne*
— *Cours de l'École Polytechnique*
- HOLANDA — *Communications from the Kamerlingh Onnes Laboratory of the University of Leiden*
- HUNGRIA — *Atomki Közlemények (Inst. of Nuclear Research of the Hung. Acad. of Sciences)*
- ÍNDIA — *Proceedings of the Indian Academy of Sciences*
- INGLATERRA — *Asta (The Assoc. of Short Circuit Testing Authorities - Inc)*
— *Comments on Solid State Physics*
— *Contributions from the Cambridge Observatories*
— *Educations in Science (Ass. for Science Education)*
— *Electrical Review*
— *Electrical Times*
— *Journal of Science & Technology*
— *Notes on Applied Science (National Physical Laboratory)*
— *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*
— *Report (National Physical Laboratory)*
— *Revue de la Société English Electric*
— *Thin Films*
— *The School Science Review (Ass. for Science Education)*
- IRLANDA — *Proceedings of the Royal Irish Academy*
— *The Scientific Proceedings of the Royal Dublin Society*
- ITÁLIA — *Annali dell'Istituto Superiore di Sanità*
— *Congressi, Convegni e Simposi Scientifici (Consiglio Nazionale delle Ricerche)*
— *La Ricerca Scientifica (Consiglio Nazionale delle Ricerche)*
— *La Scienza del Pensare (UTEP)*
— *Quaderni de «La Ricerca Scientifica»*
— *Raporti dei Laboratori di Fisica dell'Istituto Superiore di Sanità*
— *Rendiconti del Seminario della Facoltà di Scienze dell'Università de Cagliari*
- JUGOSLÁVIA — *Fizika (Editorial Office)*
— *Glasnik Matematičko - Fizicki i Astronomski*
— *Publikacije Elektrotehničkog Fakulteta Univerziteta u Beogradu*
— *Radovi Zavoda za Fiziku*
— *Reports — (Nuklearni Institut Jozef Stefan)*
- NORUEGA — *Arkiv for det Fysiske Seminar i Trondheim (Institutt for Teoretisk Fysikk)*

- POLÓNIA — *Acta Physica Polonica*
 — *Prace Komisji Nauk Technicznych (Académie Polonaise des Sciences)*
- PORTUGAL — *Agronomia Lusitana*
 — *Arquivo do Instituto Gulbenkian de Ciência*
 — *Cursos e Seminários do Instituto Gulbenkian de Ciência*
 — *Estudos de Programação e Análise Numérica do Instituto Gulbenkian de Ciência*
 — *Gazeta de Física*
 — *Gazeta de Matemática*
 — *Revista da Faculdade de Ciências de Coimbra*
 — *Revista Portuguesa de Química*
- ROMÉLIA — *Buletinul (Institutului Politehnic din Iasi)*
- RÚSSIA — *Referativnyi Zhurnal Fizika (Institut de l'Information Scientifique de l'Académie des Sciences de l'U.R.S.S.)*
- SUÉCIA — *Arkiv för Fysik*
- SUÍÇA — *Information Bulletin (International Union of Pure and Applied Chemistry)*
- TURQUIA — *Bulletin of the Turkish Physical Society*
 — *Communications de la Faculté des Sciences de l'Université d'Ankara*
Fen Fakültesi Mecmuası (İstanbul Üniversitesi)



PORTUGALIAE PHYSICA

Instructions pour les auteurs

PORTUGALIAE PHYSICA est la seule publication périodique portugaise consacrée exclusivement à la divulgation des recherches dans le domaine des Sciences Physiques. Les travaux pourront être présentés sous forme d'articles ou de brèves communications. Des articles de mise au point seront encore publiés, par invitation. Les travaux à publier devront être rédigés soit en Français, soit en Anglais, et avoir un résumé dans les deux langues. Ils seront dactylographiés à deux espacements sur une seule face du papier, l'original étant envoyé à la rédaction accompagné d'une copie.

Les figures et les tableaux devront être présentés sur des feuilles séparées. Les dessins devront être soigneusement faits à l'encre de Chine et avoir au moins le double des dimensions définitives. Les photographies seront faites sur du papier blanc brillant.

Les références bibliographiques seront indiquées dans le texte par un numéro entre parenthèses, en exposant, et groupées à la fin de l'article par l'ordre de citation. Les références à des articles dans des publications périodiques devront préciser les noms des auteurs, le titre abrégé de la revue selon le code international d'abréviation de titres de périodiques, le numéro du volume, le numéro de la première page de l'article en référence et l'année de publication. En ce qui concerne les livres, il faut indiquer les auteurs, le titre de l'ouvrage, le lieu d'impression, l'éditeur, l'année de l'édition et la page.

Les auteurs devront vérifier soigneusement le texte et les figures de leurs travaux car la rédaction ne peut pas accepter des altérations ou additions au texte original.

L'auteur d'un article ou communication recevra gratuitement 50 tirages à part. Ce nombre est réduit à 25 par auteur lorsque le même article aura l'intervention de plusieurs auteurs.

Toute correspondance doit être adressée à

PORTUGALIAE PHYSICA
Laboratório de Física da Faculdade de Ciências
Lisboa-2 (PORTUGAL)

PORTUGALIAE PHYSICA

Instructions to the authors

PORTUGALIAE PHYSICA is the only Portuguese review exclusively dedicated to the publication of research papers concerning the Physical Sciences. The papers may be presented under the form of articles or research notes. Review articles will also be published, by invitation.

The papers to be published may be written in French or in English with abstracts in both languages. They should be typed with two spaces, on one side of the page only, and the original and one copy must be submitted.

The figures and tables must be presented in separate sheets. Drawings should be carefully done in Indian ink and be at least double the definitive size. Photographs must be executed in white, glossy paper.

Bibliographical references should be indicated in the text by a number between brackets, in exponent, and grouped at the end of the article in the order they are mentioned. References to articles published in periodical publications should include the names of the authors, the abbreviated title of the publication according to the international code of abbreviation of the titles of periodicals, the issue number, the number of the first page of the article mentioned, and the year of publication. As for books, the authors, title of the work, place of the edition, editor, year of the edition, and page should be indicated.

The authors should carefully check their text and figures before submitting them, as the editor cannot accept any changes or additions to the original text. The author of an article or research note is entitled to 50 free reprints. This number is reduced to 25 per author whenever more than one author intervene in a paper.

All mail to be addressed to

PORTUGALIAE PHYSICA
Laboratório de Física da Faculdade de Ciências
Lisboa-2 (PORTUGAL)

Toute la correspondance concernant la rédaction de PORTUGALIAE PHYSICA doit être adressée à

PORTUGALIAE PHYSICA
Laboratório de Física da Faculdade de Ciências
LISBOA - 2 (Portugal)

Prix de l'abonnement: 250 escudos (US \$8.50) par volume
Prix des volumes déjà parus: 300 escudos (US \$10)
Prix du fascicule: 75 escudos (US \$2.50)

Les membres de la «Sociedade Portuguesa de Química e Física» ont une réduction de 50 % sur les prix indiqués.

Les Universités, les Laboratoires de Physique, les Académies, les Sociétés Scientifiques et les Revues de Physique sont invités à recevoir cette revue en échange de leurs publications.

PORTUGALIAE PHYSICA donnera un compte-rendu détaillé de tous les ouvrages soumis à la rédaction en deux exemplaires.

All mail concerning PORTUGALIAE PHYSICA to be addressed to:

PORTUGALIAE PHYSICA
Laboratório de Física da Faculdade de Ciências
LISBOA - 2 (Portugal)

Subscription rates: 250 escudos (US \$8.50) per volume
Price of past volumes: 300 escudos (US \$10)
Price of copy: 75 escudos (US \$2.50)

Members of the «Sociedade Portuguesa de Química e Física» may obtain *Portugaliae Physica* at a reduced price (50 %).

Universities, Physics Laboratories, Academies, Scientific Societies and Physics Publications are invited to receive this review in exchange for their publications.

PORTUGALIAE PHYSICA will give a detailed report of any book if two copies have been submitted.

