



HAL
open science

Entraînement dans l'écorce d'une étoile à neutrons

Nicolas Chamel

► **To cite this version:**

Nicolas Chamel. Entraînement dans l'écorce d'une étoile à neutrons. Physique mathématique [math-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2004. Français. NNT: . tel-00011130

HAL Id: tel-00011130

<https://theses.hal.science/tel-00011130v1>

Submitted on 29 Nov 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Ecole doctorale de Physique de la région Parisienne (ED107)

THÈSE de DOCTORAT de l'Université PARIS VI

présentée par

Nicolas CHAMEL

pour obtenir le grade de DOCTEUR de l'Université Paris VI

Spécialité : Physique Théorique

Entraînement dans l'écorce d'une étoile à neutrons

Soutenue le 15 décembre 2004, devant le jury composé de :

M. Richard KERNER	président
M. Brandon CARTER	directeur de thèse
M. Nils ANDERSSON	rapporteur
M. Jacques MEYER	rapporteur
M. Joaquin DIAZ-ALONSO	examineur
M. Nguyen VAN GIAI	examineur
M. Nicolas RIVIER	invité

« le jour où la science pure ne serait pas cultivée pour elle-même et où sa beauté propre ne séduirait pas les imaginations d'une partie de l'élite, la décadence de la civilisation matérielle ne tarderait pas à se produire rapidement et l'humanité retournerait en quelques siècles à la barbarie primitive ou, ce qui est pis encore, évoluerait vers une barbarie organisée et figée comparable à la vie monotone des fourmis et des abeilles. »

Emile Borel, *L'Espace et le Temps*, librairie Félix Alcan, Paris (1923), p97.

Table des matières

Résumé	vii
Abstract	ix
Introduction	1
1 Étoiles à neutrons	5
1.1 Introduction	5
1.2 De la relativité générale	6
1.3 A la physique nucléaire	6
1.4 L'intérieur d'une étoile à neutrons	8
1.4.1 La matière dans tous ses états	8
1.4.2 Structure	14
2 Pulsars	19
2.1 Introduction	19
2.2 Origine des pulsars	20
2.2.1 Données observationnelles	20
2.2.2 Origine de la périodicité	24
2.2.3 Origine des pulses	25
2.2.4 Associations entre supernovae et étoiles à neutrons	25
2.3 Ralentissement des pulsars	26
2.3.1 Estimation de la température de surface	26
2.3.2 Estimation du champ magnétique	26
2.3.3 Indices observationnels	27
2.4 Irrégularités de la période	28
2.4.1 Bruit de synchronisation	28
2.4.2 Sauts de fréquences	28
2.5 Les sauts de fréquence comme sondes de la structure interne des pulsars . .	30
2.5.1 Changement d'ellipticité	30
2.5.2 Avalanche de tourbillons superfluides	32
2.5.3 Mouvement de tubes de flux magnétique	33

I	Etude macroscopique d'une étoile à neutrons	37
3	Formulation covariante de l'espace-temps newtonien	39
3.1	Introduction	39
3.1.1	Des notions de temps et d'espace à l'espace-temps	39
3.1.2	De la relativité restreinte à la relativité générale	40
3.1.3	Structure de l'espace-temps d'Einstein	41
3.2	Structure de l'espace-temps newtonien	43
3.2.1	Principe de relativité	44
3.2.2	Du caractère intrinsèquement covariant ou contravariant des tenseurs	46
3.2.3	Formulation covariante du principe de relativité	49
3.2.4	Principe de relativité comme l'invariance sous une symétrie de jauge	50
3.2.5	Mesures de volume	50
3.2.6	Connexion	51
3.3	Espace-temps de Newton-Cartan	52
3.3.1	Gravitation et symétrie de jauge	53
3.3.2	Connexion de Newton-Cartan	55
3.3.3	Courbure de l'espace-temps	56
4	Hydrodynamique d'un mélange de fluides non relativistes	59
4.1	Principe variationnel	60
4.1.1	Particules ponctuelles	60
4.1.2	Fluide parfait	63
4.2	Invariance de jauge	78
4.3	Mélange de fluides parfaits	80
4.3.1	Application au modèle de Tisza-Landau à deux fluides	83
4.3.2	Théorème de Kelvin-Helmholtz généralisé	86
4.3.3	Hélicité d'un mélange de fluides	86
4.3.4	Fluides chargés	87
4.3.5	Dynamique du champ de gravitation	88
4.4	Tenseur énergie-impulsion	89
4.4.1	Définition	89
4.4.2	Identités de Noether	92
4.4.3	Densité d'énergie et de 3-impulsion	94
4.5	Symétries et vecteurs de Killing généralisés	96
4.5.1	Transformations infinitésimales de jauge	97
4.5.2	Propriétés des vecteurs de Killing	98
4.5.3	Espace-temps de Newton-Cartan et vecteurs de Killing	100
4.5.4	Vecteurs de Killing et symétries	101
4.5.5	Application : cosmologie de Milne	102
4.5.6	Lois de conservation et courants d'impulsions généralisées	104
4.5.7	Théorème de Bernoulli généralisé	105
4.5.8	Problème de Iordanskii	107

4.6	Théorème du viriel	110
5	Modèle à deux fluides pour une étoile à neutrons	119
5.1	Introduction	119
5.2	Modèle à deux fluides pour le manteau d'une étoile à neutrons	120
5.3	Modèle à deux fluides pour l'écorce interne	124
5.4	Evaluation des masses effectives	129
5.4.1	Etude microscopique	129
5.4.2	Neutrons de conduction	131
5.4.3	Description unifiée	133
5.4.4	Lien entre microscopique et macroscopique	133
II	Etude microscopique d'une étoile à neutrons	135
6	Physique nucléaire et étoile à neutrons	137
6.1	Introduction	137
6.2	Une hiérarchie d'approximations : du macroscopique au microscopique . . .	138
6.2.1	Modèle de la goutte liquide	138
6.2.2	Modèle de la goutte liquide compressible	140
6.2.3	Modèle de particules indépendantes	140
6.3	Du problème à N corps à l'approximation du champ moyen	142
6.3.1	Interaction nucléon-nucléon et effets de milieu	142
6.3.2	Interaction nucléon-nucléon effective et champ moyen	144
6.3.3	Approximations semi-classiques	146
6.4	Structure d'une étoile à neutrons	146
6.4.1	Matière froide catalysée	146
6.4.2	Description de l'écorce d'une étoile à neutrons	147
6.4.3	Ecorce externe	147
6.4.4	Ecorce interne	149
6.4.5	Phases exotiques	150
7	Théorie des bandes	153
7.1	Introduction	153
7.2	Modèle des bandes	155
7.2.1	Approximations	155
7.2.2	De la physique du solide à la physique nucléaire	156
7.3	Symétries en mécanique quantique	157
7.3.1	Symétrie et groupe de Schrödinger	158
7.3.2	Représentations du groupe de Schrödinger	159
7.3.3	Principe de Wigner	160
7.3.4	Représentations irréductibles d'un groupe	161
7.3.5	Théorème de projection	166

7.3.6	Règles de sélection	168
7.3.7	Développement de Clebsch-Gordan-Wigner	169
7.4	Représentations du groupe symétrique	170
7.5	Symétries d'un cristal	171
7.5.1	Groupe d'espace	172
7.6	Représentations du groupe d'espace	176
7.6.1	Représentations irréductibles du sous-groupe des translations	176
7.6.2	Réseau réciproque et zone de Brillouin	177
7.6.3	Théorème de Floquet-Bloch	178
7.6.4	Analyticité des bandes d'énergies	181
7.6.5	Représentations irréductibles du groupe d'espace	182
7.6.6	Relations de compatibilité	184
7.6.7	Invariance par renversement du temps	184
7.7	Limite de la matière nucléaire homogène	185
7.7.1	Groupes continus et symétries	185
7.7.2	Modèle du gaz de Fermi	186
7.7.3	Limite thermodynamique	187
7.7.4	Etat fondamental à $T=0$ et surface de Fermi	188
7.7.5	Densité d'états et espacement de niveaux	189
7.8	Surface de Fermi dans la théorie des bandes	191
7.8.1	Définition	191
7.8.2	Symétries de la surface de Fermi	191
7.8.3	Propriétés de la surface de Fermi sur les bords de zone	193
7.8.4	Densité d'états et topologie de la surface de Fermi	194
7.8.5	Exemple du cubium	196
7.8.6	Points critiques et relations de Morse	200
8	Approximation Hartree-Fock	201
8.1	Introduction	201
8.2	Corrélation de Pauli et méthodes d'approximation en physique nucléaire	202
8.3	Approximation Hartree-Fock	204
8.3.1	Principe variationnel	204
8.3.2	Ansatz de Fermi	207
8.4	Application à la description de l'écorce d'une étoile à neutrons	208
8.4.1	Conditions aux limites	208
8.4.2	Approximation de Wigner-Seitz	209
8.5	Interaction phénoménologique de type Skyrme	210
9	Evaluation des coefficients d'entraînement	217
9.1	Description microscopique des neutrons	217
9.1.1	Approximation de particules indépendantes	217
9.1.2	Du microscopique aux observables macroscopiques	218
9.1.3	Définition des neutrons de conduction	221

9.2	Etats d'équilibre	221
9.2.1	Configurations statiques	221
9.2.2	Configurations non statiques	222
9.3	Détermination des coefficients d'entraînement	224
9.3.1	Relation entre courant et impulsion	224
9.3.2	Du concept de masse effective mésoscopique	226
9.4	Application à la matière nucléaire homogène	227
10	Méthodes numériques	233
10.1	Calcul du spectre d'énergie	233
10.1.1	Méthode de Rayleigh-Ritz	234
10.1.2	Théorème de Hellmann-Feynman	236
10.2	Application au calcul de la structure de bandes	236
10.2.1	Ondes planes	236
10.2.2	Ondes planes orthogonales	239
10.2.3	Pseudopotentiel	243
10.2.4	Ondes planes augmentées	243
10.2.5	Ondes planes augmentées linéarisées	247
10.3	Méthodes d'intégrations	251
10.3.1	Intégration dans la zone de Brillouin	252
10.3.2	Intégration sur la surface de Fermi	258
11	Résultats	269
11.1	Couches peu profondes de l'écorce interne	269
11.1.1	Modèle	269
11.1.2	Méthode de calcul	273
11.1.3	Discussion	275
11.2	Couches profondes de l'écorce	287
11.2.1	Modèle	287
11.2.2	Noyaux sphériques	291
11.2.3	Configurations de type lasagnes	293
11.2.4	Configurations de type spaghetti	296
11.2.5	Méthode de calcul	298
11.2.6	Discussion	299
11.2.7	Effets du couplage spin-orbit	304
11.3	Evolution de la masse effective à travers l'écorce interne	306
11.4	Calculs Hartree-Fock autocohérents	308
11.4.1	Traitement semi-classique des protons	309
11.4.2	Méthode de calculs	310
11.4.3	Résultats et discussion	312
11.5	Modèle à deux fluides et effets d'entraînement	315
	Conclusions et perspectives	319

Remerciements	323
A Topologie et géométrie différentielle	325
A.1 Continuité et espaces topologiques	325
A.2 Variété différentiable	327
A.2.1 variété topologique	327
A.2.2 variété différentiable	327
A.3 Définition des tenseurs	327
A.3.1 espace tangent	328
A.3.2 espace cotangent	328
A.3.3 tenseurs d'ordre quelconque	329
A.3.4 champs tensoriels	330
A.4 Applications linéaires tangentes et cotangentes	331
A.5 Formes différentielles et algèbre extérieure	331
A.5.1 Produit extérieur	332
A.5.2 Dérivée extérieure	333
A.5.3 Dérivée de Lie	333
A.5.4 Intégration de formes différentielles	334
A.6 Connexion et dérivée covariante	335
B Masses effectives dans les couches profondes	337
B.1 Noyaux ou bulles sphériques	337
B.2 Noyaux exotiques	337
B.2.1 cylindres	338
B.2.2 plans	338
B.2.3 tubes	338
C Paramétrisation des forces de Skyrme	339
C.1 SLy4	339
C.2 RATP	339
C.3 SkM*	340
C.4 SGII	340
C.5 SII	340
Liste des Tableaux	341
Liste des Figures	343
Bibliographie	347

Résumé

Ce travail traite des aspects macroscopiques et microscopiques de l'écorce interne d'une étoile à neutrons, formée d'un solide de noyaux plongé dans un superfluide de neutrons. Une première partie expose une formulation quadridimensionnelle covariante de l'hydrodynamique non relativiste d'un mélange de fluides parfaits, basée sur un principe variationnel convectif. Ce formalisme est appliqué à la description de l'écorce, comme un mélange de deux fluides, un superfluide de neutrons et un plasma de noyaux et d'électrons, couplés par un entraînement non dissipatif. La seconde partie est dédiée à l'étude microscopique de cet entraînement. Appliquant des méthodes de champ moyen au-delà de l'approximation de Wigner-Seitz, nous montrons que cet entraînement résulte de la diffraction de Bragg des neutrons libres sur les noyaux. Celle-ci se traduit par une masse de neutron effective « mésoscopique », qui, contrairement à la masse effective « microscopique », est très grande devant la masse « nue » dans les couches intermédiaires.

Abstract

The inner crust of a neutron star, which is composed of a solid Coulomb lattice of nuclei immersed in a neutron superfluid, is studied from both a macroscopic and a microscopic level. In a first part, we develop a non relativistic but four dimensionally covariant formulation of the hydrodynamics of a perfect fluid mixture based on a variational principle. This formalism is applied to the description of neutron star crust as two fluid model, a neutron superfluid and a plasma of nuclei and electrons coupled via non dissipative entrainment effects, whose microscopic evaluation is studied in a second part. Applying mean field methods beyond the Wigner-Seitz approximation, the Bragg scattering of dripped neutrons upon crustal nuclei lead to a « mesoscopic » effective neutron mass, which unlike the « microscopic » effective mass, takes very large values compared to the bare mass in the middle layers of the crust.

Introduction

Les étoiles à neutrons, imaginées dans les années 1930 et observées seulement plus d'une trentaine d'années plus tard sous forme de pulsars, sont un défi lancé à notre compréhension de la matière dans des conditions extrêmes qui sont, pour l'heure inaccessibles en laboratoire. Ces astres sont parmi les plus compacts de l'univers, avec une densité au centre pouvant atteindre quelques dix mille milliards de fois celle au centre de la Terre. A de telles densités, les atomes et même les noyaux ne peuvent résister aux gigantesques pressions qui règnent au sein de l'étoile, dévoilant ainsi de nouveaux états de la matière. Certains modèles prédisent même l'existence au coeur de l'étoile d'un plasma de quarks, de gluons et d'électrons, que les chercheurs tentent de mettre en évidence de façon artificielle dans les plus grands accélérateurs de particules.

L'écorce d'une étoile à neutrons nous offre également la possibilité d'explorer de nouvelles phases de la matière. L'écorce est formée d'un cristal coulombien de noyaux fortement enrichis en neutrons et plongés dans un gaz d'électrons relativistes. A des densités de l'ordre de $4 \times 10^{11} \text{ g.cm}^{-3}$, les noyaux sont en outre immergés dans un superfluide de neutrons. Plusieurs modèles indiquent également la présence, dans les couches les plus profondes de l'écorce, de phases plus exotiques dans lesquelles les noyaux adopteraient des formes inhabituelles, comme par exemple des noyaux très allongés ou complètement aplatis. Dans les régions les plus denses, à l'interface entre la croûte et le manteau, la matière pourrait consister en des bulles de gaz de neutrons à l'intérieur d'un liquide nucléaire.

Bien qu'elle ne représente qu'une petite fraction de la masse totale de l'étoile, l'écorce a des conséquences importantes sur sa dynamique et sur un certain nombre de phénomènes observables. Ainsi la seule existence d'une fine couche de bulles de neutrons dans la croûte peut affecter de façon significative les taux d'émission de neutrinos et donc le refroidissement d'une étoile de faible masse. Comme autre exemple, les brusques sauts de fréquences observés dans certains pulsars s'interprètent comme un transfert discontinu de moment cinétique entre le superfluide de neutrons et la croûte, néanmoins l'origine de ces sauts reste mal comprise. Le mécanisme d'émission électromagnétique du pulsar dépend lui même très fortement de l'évolution du champ magnétique dans l'écorce. Par ailleurs, une étoile à neutrons rassemble une énergie si importante, que des vibrations de l'étoile engendrent des déformations de l'espace-temps qu'il sera possible de détecter dans quelques années. L'analyse de ces ondes gravitationnelles, prédites par la théorie de la relativité générale d'Einstein et décelées de façon indirecte par l'observation de pulsars

binaires par Hulse et Taylor en 1974 (prix Nobel de physique 1993), ouvrira la voie dans un futur proche à un nouveau domaine de l'astronomie. Des détecteurs, comme VIRGO et LIGO, sont d'ailleurs déjà en cours de calibration. L'influence de l'écorce sur les modes d'oscillations d'une étoile à neutron et donc sur l'émission d'ondes gravitationnelles, reste à préciser.

L'interprétation de ces données observationnelles nécessite de pouvoir disposer de modèles hydrodynamiques dont les paramètres sont ajustés sur la physique microscopique sous-jacente. Ce travail s'articule autour de ces deux aspects, à travers deux grandes parties complémentaires portant sur l'étude de l'écorce d'une étoile à neutrons, d'une part d'un point de vue macroscopique à travers des modèles hydrodynamiques et d'autre part d'un point de vue microscopique.

Les deux premiers chapitres donnent un aperçu général sur les étoiles à neutrons et sur les pulsars. La première partie est consacrée à l'étude macroscopique de l'écorce d'une étoile à neutrons, assimilée à un mélange de fluides parfaits dans un cadre entièrement non relativiste de façon à faciliter le lien avec la microphysique. Après avoir décrit dans le chapitre 3, la structure géométrique de l'espace-temps newtonien et le principe de relativité, le chapitre 4 présente une formulation quadridimensionnelle entièrement covariante de l'hydrodynamique, déduite d'un principe variationnel convectif. Les principaux théorèmes de l'hydrodynamique sont redémontrés dans ce nouveau cadre et généralisés pour traiter le cas d'un mélange de plusieurs fluides. Nous étudions également en détails les conséquences des symétries de l'espace-temps et du milieu matériel. Une attention particulière est portée sur les théorèmes du viriel qui sont d'une aide précieuse pour tester la convergence des simulations numériques.

Le chapitre 5 est une application de ce formalisme à la description d'une étoile à neutrons comme un mélange de deux fluides, couplés uniquement par des effets non dissipatifs d'entraînement. En particulier, nous montrons comment ce modèle, historiquement introduit pour l'étude du coeur d'une étoile à neutrons, peut être généralisé très simplement à l'écorce interne en considérant un superfluide de neutrons et un « fluide » de noyaux et d'électrons.

La seconde partie est consacrée à la détermination qualitative et quantitative des effets d'entraînement entre les deux fluides et débute par un chapitre d'introduction (chapitre 6) sur la physique nucléaire et les principales approches qui ont été suivies jusqu'à présent pour l'étude de la structure de l'écorce d'une étoile à neutrons, depuis les modèles de goutte liquide jusqu'aux calculs de champs moyens. Ces derniers, qui traitent les noyaux comme s'ils étaient isolés, sont clairement inadaptées à la description des neutrons libres et mettent en évidence la nécessité d'une dérivation plus rigoureuse des conditions aux limites.

Le chapitre 7 expose la théorie des bandes, développée initialement dans le contexte des électrons libres dans un solide ordinaire, et qui s'applique naturellement à la description des neutrons libres dans l'écorce. La théorie des bandes est abordée dans le cadre plus générale de la théorie des représentations d'un groupe en mécanique quantique et du principe de Wigner. Nous discutons ensuite plus spécifiquement des représentations du groupe de symétrie de particules plongées dans un milieu cristallin, notamment du

théorème de Floquet-Bloch, des concepts de réseaux réciproques et de zones de Brillouin.

Le chapitre 8 présente en détails l'approximation Hartree-Fock avec des interactions à deux corps effectives et l'application de cette méthode pour la description des neutrons libres dans l'écorce d'une étoile à neutrons. Nous discutons en particulier des conditions aux limites et de la validité de l'approximation de Wigner-Seitz, qui a été appliquée presque exclusivement depuis les premiers calculs il y a une trentaine d'années.

Dans le chapitre 9, nous montrons comment faire le lien entre les différents niveaux de description. Plus précisément, nous indiquons comment déterminer les paramètres qui apparaissent dans le modèle à deux fluides d'une étoile à neutrons et en particulier de l'écorce, à partir des études microscopiques des chapitres précédents.

Le chapitre 10 présente les différentes méthodes numériques empruntées à la physique du solide qui ont été employées dans ce travail, tant pour résoudre l'équation de Schrödinger avec des conditions aux limites de Bloch, que les méthodes d'intégration dans la zone de Brillouin et sur la surface de Fermi. Ces dernières méthodes étant absentes des ouvrages standards de physique du solide, nous avons pris soin de préciser systématiquement les références des articles originaux. Les résultats sont discutés en détails dans le chapitre 11.

Chapitre 1

Étoiles à neutrons

Sommaire

1.1	Introduction	5
1.2	De la relativité générale	6
1.3	A la physique nucléaire	6
1.4	L'intérieur d'une étoile à neutrons	8

1.1 Introduction

Le soir même de l'annonce de la découverte du neutron par James Chadwick en 1932, Landau aurait selon la légende, envisagé la possibilité que les étoiles possèdent un coeur de neutrons comme source de leur énergie. Une hypothèse qu'il publiera en 1938. Entre-temps l'astronome Fritz Zwicky fasciné par les phénomènes astrophysiques très énergétiques qu'il nomma *supernovae*, formula le concept d'*étoiles à neutrons* qu'il présenta avec Walter Baade à l'université de Stanford lors d'une réunion de l'American Physical Society en 1933 :

« With all reserve we advance the view that supernovae represent the transitions from ordinary stars into *neutrons stars*, which in their final stages consist of extremely closely packed neutrons. »

Phys. Rev. **V45-I2**, (1933) Minutes of the Stanford meeting, December 15-16, 1933, p138.

Robert Oppenheimer et son étudiant George Volkoff calculèrent pour la première fois la structure d'une telle étoile en 1939 dans le cadre de la relativité générale. Il faudra cependant attendre près de trente ans pour que les spéculations théoriques sur les étoile à neutrons soient confirmées par la découverte des *pulsars* par une jeune étudiante, Jocelyn Bell, rapidement identifiés par Gold comme des étoiles à neutrons magnétisées en rotation.

Une étoile à neutrons est un astre d'une dizaine de kilomètres de rayon seulement, ce qui le classerait dans la catégorie des astéroïdes par sa taille si sa masse n'était pas aussi énorme, de l'ordre de la masse du soleil, soit l'équivalent de toute la population humaine ayant vécu sur Terre (80 milliards d'individus environ), comprimée dans un dé à coudre ! Une étoile à neutrons est donc un objet extrêmement compact qui, comme on peut s'y attendre, est le siège d'une physique très riche.

1.2 De la relativité générale

Une concentration de masse aussi importante implique des distorsions significatives de l'espace-temps. D'ailleurs le rayon d'une étoile à neutrons est du même ordre de grandeur que le rayon de Schwarzschild $R_s = 2GM/c^2$ qui représente l'horizon d'un trou noir sphérique de même masse M . L'avance du périhélie de Mercure¹ de 43 secondes d'arcs par siècle, qui a été une des premières confirmations de la théorie de la relativité générale d'Einstein, est à comparer avec les 4.2 degrés par an dans le système binaire d'étoiles à neutrons PSR1913+16. Russel Hulse et Joseph Taylor de l'université de Princeton qui ont découvert ce système en 1975, se sont aperçus que la période orbitale diminuait environ 76 millièmes de secondes par an ce qui est précisément en accord avec la perte d'énergie par émission d'ondes gravitationnelles, prédite par la théorie de la relativité générale comme l'illustre la figure 1.1. Le prix Nobel de Physique leur a été décerné en 1993 pour cette découverte. De par leur gravitation, les étoiles à neutrons sont donc des candidats potentiels pour la détection d'ondes gravitationnelles dans les prochaines années, élargissant ainsi le spectre des observations à une toute nouvelle astronomie.

La gravitation qui règne sur une étoile à neutrons est si forte qu'elle a pour effet de lisser la surface de l'étoile, les "montagnes" éventuelles ne dépassant pas quelques millimètres. La pression gravitationnelle écrase la matière jusqu'à des densités de l'ordre de 10^{15} fois la densité terrestre, en un mélange essentiellement de neutrons (d'où leur nom !), de protons et d'électrons, éventuellement d'autres particules exotiques, comme des quarks déconfinés au centre de l'étoile. Dans ces conditions la matière est dégénérée et l'agitation quantique des particules fournit l'énergie nécessaire pour maintenir la cohésion de l'étoile.

1.3 A la physique nucléaire

Les densités dans le coeur d'une étoile à neutrons peuvent atteindre plusieurs fois la densité à l'intérieur des noyaux de l'ordre de 10^{14} g.cm⁻³. Plus précisément, une étoile

¹La précession de l'orbite de Mercure avec le temps trahit en théorie newtonienne la présence d'une force gravitationnelle qui ne varie pas comme l'inverse du carré de la distance comme dans le cas de deux corps seulement, en l'occurrence Mercure et le Soleil (on peut montrer plus généralement que les orbites sont fermées uniquement pour des potentiels de type harmoniques ou Képlériens : c'est le théorème de Bertrand). Les forces induites par les autres planètes ne peuvent à elles seules expliquer l'avance du périhélie.

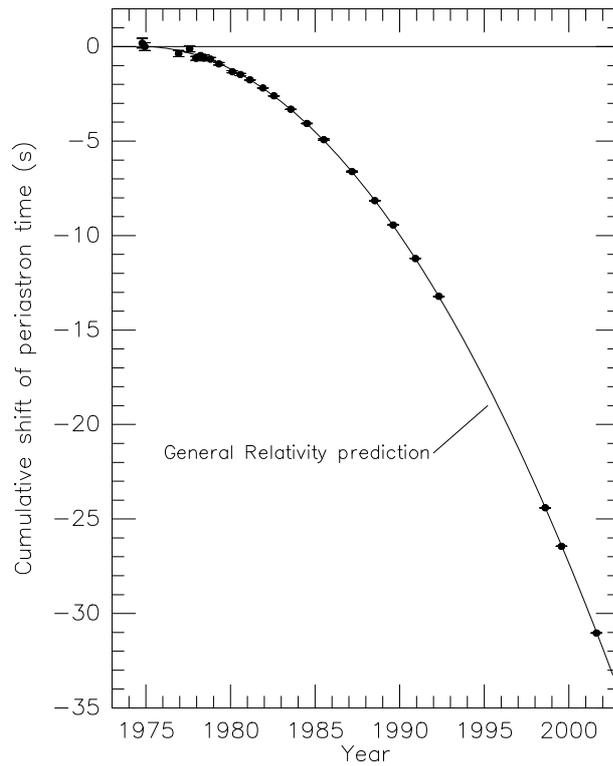


FIGURE 1.1 – Diminution de la période orbitale du pulsar binaire PSR1913+16 prédite par la théorie de la relativité générale (trait plein) comparée aux mesures observationnelles (points) par Weisberg & Taylor (2003)

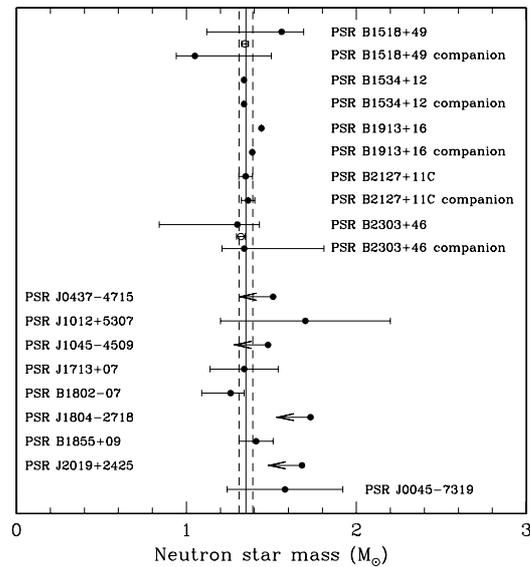


FIGURE 1.2 – Mesure de la masse d'étoiles à neutrons dans des systèmes binaires en unités de masses solaires M_{\odot} par Thorsett & Chakrabarty (1999)

à neutrons est un gigantesque noyau atomique constitué de 10^{57} nucléons environs ! Oppenheimer & Volkoff (1939) ont effectué le premier calcul de la structure d'une étoile à neutrons en relativité générale. Ils ont montré que, à la différence de la théorie newtonienne de la gravitation, il existe une masse maximale M_{\max} au-delà de laquelle il n'existe pas de configuration d'équilibre, autrement dit une étoile dont la masse excède M_{\max} s'effondre pour former un « trou noir » selon l'expression de John Archibald Wheeler. Pour leur calcul, comme les forces nucléaires étaient mal connues, ils supposèrent que l'intérieur de l'étoile était simplement formée d'un gaz dégénéré de neutrons sans interaction. La masse maximale correspondante était de $M_{\max} = 0.72M_{\odot}$. Cameron (1959) améliora le calcul d'Oppenheimer-Volkoff en tenant compte des forces nucléaires (interaction de type Skyrme) et obtint une masse maximale $M_{\max} = 2M_{\odot}$. Ceci montre que les forces nucléaires jouent un rôle crucial dans les étoiles à neutrons. Les incertitudes sur les théories de la matière nucléaire à très haute densité se manifestent par des différences importantes dans les prédictions de la masse maximale d'une étoile à neutrons. Ces théories sont néanmoins contraintes par les observations puisque la masse maximale doit être supérieure aux masses mesurées. Les déterminations de masses les plus précises réalisées dans des pulsars binaires et résumées dans la figure 1.2, conduisent à des valeurs autour de $1.4M_{\odot}$, proche de la limite de Chandrasekhar confirmant le scénario de formation des étoiles à neutrons lors de supernovae (voir par exemple Shapiro & Teukolsky (1983)).

1.4 L'intérieur d'une étoile à neutrons

1.4.1 La matière dans tous ses états

La densité à l'intérieur d'une étoile à neutrons varie de plusieurs ordres de grandeur entre la surface et le coeur, atteignant des valeurs entre 10^{14} et 10^{15} g.cm⁻³ au centre. Dans le scénario standard, une étoile à neutrons est formée pour l'essentiel de neutrons, protons et électrons dans des phases différentes : solide, fluide (liquide ou gaz) ou superfluide.

La température à l'intérieur d'une étoile à neutrons est de l'ordre de plusieurs centaines de millions de degrés $T \sim 10^8$ K mais l'énergie thermique correspondante est en général complètement négligeable devant l'énergie d'agitation quantique. De ce point de vue l'étoile est un astre froid. La matière est donc dégénérée, c'est-à-dire dans un régime où les effets quantiques dominent.

L'état de la matière dans une étoile à neutrons peut être déterminé entièrement avec les données expérimentales accessibles en laboratoire jusqu'à une densité de l'ordre de 10^{11} g/cm³ (voir Haensel & Pichon (1994)) ce qui correspond seulement à la région externe de l'écorce. Pour les couches plus profondes, il est nécessaire d'extrapoler les modèles de physique nucléaire en dehors des régimes pour lesquels ils sont ajustés. Par exemple, les noyaux dans l'écorce interne baignent dans un superfluide de neutrons. Ce type de milieu n'a pas d'équivalent sur Terre, même si des progrès ont été réalisés en laboratoire, dans l'étude des halos de neutrons qui entourent certains noyaux. Les incertitudes sont encore

TABLEAU 1.1 – Quelques équations d'états pour le coeur liquide d'une étoile à neutrons d'après Haensel (2003).

Equation d'état	composition et modèle	référence
BPAL12	$npe\mu$, fonctionnelle de densité effective	Bombaci (1995)
BGN1H1	$np\Sigma\Lambda\Xi e\mu$, effective baryon energy functional	Balberg <i>et al.</i> (1999)
BBB1	$npe\mu$, théorie de Brueckner, potentiels NN de Argonne et NNN de Urbana	Baldo <i>et al.</i> (1997)
FPS	$npe\mu$, fonctionnelle de densité d'énergie effective	Pandharipande & Ravenhall (1989)
BGN2H1	$np\Sigma\Lambda\Xi e\mu$, fonctionnelle de densité d'énergie effective	Balberg <i>et al.</i> (1999)
BBB2	$npe\mu$, théorie de Brueckner, potentiel NN de Paris et potentiel NNN de Urbana	Baldo <i>et al.</i> (1997)
SLy	$npe\mu$, goutte liquide compressible avec une fonctionnelle de densité effective	Douchin & Haensel (2001)
BGN1	$npe\mu$, fonctionnelle de densité effective	Balberg <i>et al.</i> (1999)
APR	$npe\mu$, théorie variationnelle, potentiel NN de Nijmegen et potentiel NNN de Urbana	Akmal <i>et al.</i> (1998)
BGN2	$npe\mu$, fonctionnelle de densité d'énergie effective	Balberg <i>et al.</i> (1999)

plus grandes dans le manteau et le coeur d'une étoile à neutrons, où la densité est de plusieurs fois la densité au centre des noyaux. Dans cette région de l'étoile, la matière est fortement enrichie en neutrons. Or les théories de la matière nucléaire homogène infinie sont ajustées sur les propriétés des noyaux lourds dont les nombres de neutrons et de protons sont du même ordre. A cela s'ajoute la difficulté à résoudre le problème à N corps pour lequel il est nécessaire de considérer non seulement les interactions nucléons-nucléons à deux corps mais également les interactions à trois corps. C'est ce qui explique les incertitudes dans les calculs de la structure globale d'une étoile à neutrons, comme l'illustre la figure 1.3.

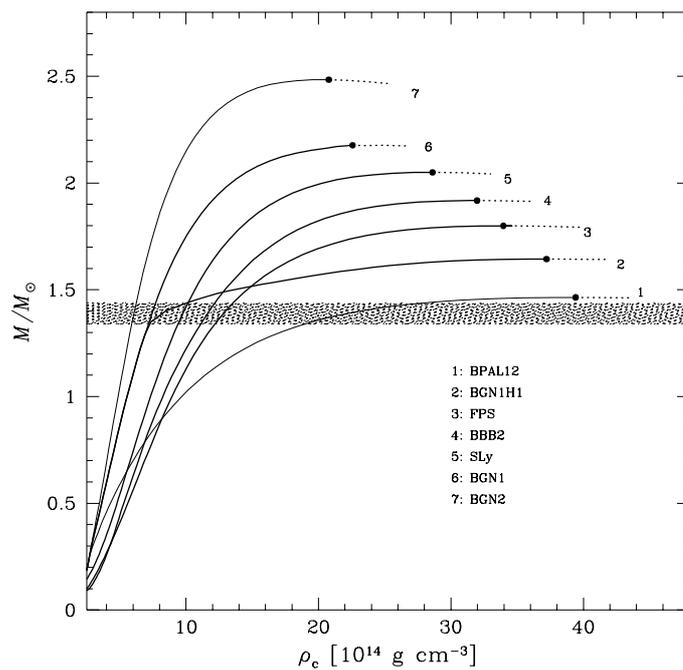


FIGURE 1.3 – Masse gravitationnelle M d’une étoile à neutrons en fonction de la densité centrale ρ_c , pour différentes équations d’états d’après Haensel (2003). Les lignes pointillées signalent les configurations instables par rapport à des perturbations radiales. La bande grisée représente l’intervalle des masses mesurées des pulsars binaires. Les acronymes des équations d’états sont précisés dans le tableau 1.1.

gaz d'électrons relativistes

Les électrons ne contribuent quasiment pas à la masse de l'étoile, $m_e \ll m_p$, mais assure l'électroneutralité globale d'où $n_e = n_p$. Sous l'effet de la pression de dégénérescence les électrons se déplacent avec des vitesses d'autant plus grandes que la densité est importante. A partir d'une certaine densité, ces vitesses ne sont plus négligeables devant la vitesse de la lumière. Nous pouvons estimer cette densité en adoptant le modèle du gaz de Fermi à température nulle.

L'énergie cinétique moyenne par particule d'un gaz de Fermi de densité n est de l'ordre de l'énergie de Fermi retranchée de l'énergie de repos ou énergie de masse mc^2

$$E_{\text{cin}} = c\sqrt{\hbar^2 k_F^2 + m^2 c^2} - mc^2, \quad k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}. \quad (1.1)$$

Lorsque $k_F c \sim mc$, c'est-à-dire lorsque la distance moyenne entre les particules est de l'ordre de la longueur d'onde de Compton $\lambda = \hbar/mc$, les effets relativistes sont importants. La densité correspondante est de l'ordre de

$$n_{\text{rel}} = \frac{1}{\lambda^3} = \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^3. \quad (1.2)$$

Les nucléons ne sont pas relativistes, en revanche les électrons, plus légers le deviennent pour une densité de masse $\rho = n_p m_p = n_e m_p$, et en utilisant l'équation (1.2) pour les électrons, cette densité s'écrit

$$\rho \sim m_p \left(\frac{m_e c}{\hbar}\right)^3 \sim 10^7 \text{ g/cm}^3. \quad (1.3)$$

Les électrons ne sont pas des particules libres mais portent une charge électrique e et sont donc soumis aux interactions électromagnétiques. Le nombre Γ défini par

$$\Gamma \equiv \frac{e^2}{a E_{\text{cin}}} \quad (1.4)$$

où a est la distance moyenne entre deux électrons

$$a = \left(\frac{3}{4\pi n_e}\right)^{1/3}, \quad (1.5)$$

mesure le rapport entre énergie potentielle et énergie cinétique. Pour un gaz de Fermi non relativiste, $\Gamma \propto n^{-1/3}$. A basse densité ce rapport peut donc être très supérieur devant l'unité. Wigner a ainsi prédit dans les années 30 qu'un gaz d'électrons suffisamment dilué se solidifie en un cristal, comme le suggère également le diagramme de phase de la figure 1.4, issu d'un calcul plus récent. Jusqu'à ce jour, la question n'a pas été complètement tranchée. Dans un gaz d'électrons non relativiste, $\Gamma \simeq 0.543 r_s$ avec $r_s = a/a_0$, a_0 étant le rayon de Bohr. Dans un métal ordinaire, $r_s \sim 2 - 6$ et $\Gamma \sim 1$ donc les électrons sont fortement corrélés (liquide d'électrons). Dans une étoile à neutrons au contraire, les électrons sont ultra relativistes, dans ce cas Γ est indépendant de la densité et de l'ordre de la constante de structure fine $\Gamma \sim \alpha = e^2/\hbar c \simeq 1/137$ donc $\Gamma \ll 1$. Dans une très bonne approximation, les électrons peuvent donc être considérés comme un gaz dégénéré ultra relativiste.

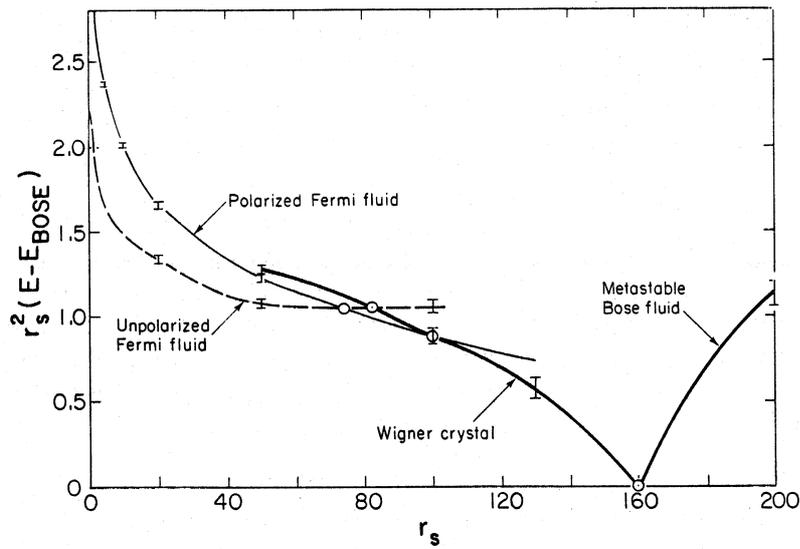


FIGURE 1.4 – Diagramme de phases d’un ensemble d’électrons dans un milieu uniforme de charges positives par Ceperley & Alder (1980). Le graphique représente l’énergie multipliée par r_s^2 en Rydberg comme une fonction de r_s . L’origine des énergie est l’énergie E_{BOSE} du fluide de Bose pour $r_s = 160$.

écorce solide de noyaux

Dans les couches externes d’une étoile à neutrons, les nucléons se regroupent en noyaux, disposés selon un arrangement plus ou moins ordonné de façon à réduire la répulsion coulombienne, formant ainsi une écorce solide.

Un plasma classique de noyaux, de charge Ze dans un gaz d’électrons cristallise en un solide de structure cubique centré lorsque le rapport

$$\Gamma_{\text{crist}} = \frac{Ze^2}{dk_{\text{B}}T_{\text{crist}}} \quad (1.6)$$

est de l’ordre de $\Gamma_{\text{crist}} \simeq 171$ (Nagara *et al.* (1987), voir Ichimaru (1982) pour une revue), où T_{crist} est la température de solidification et d la distance moyenne entre deux plus proches noyaux. Pour une étoile à neutrons, la température de solidification de l’écorce varie de $T_{\text{crist}} \sim 10^8 - 10^9$ K pour des densités $\rho > 10^9$ g/cm³, ces températures sont légèrement inférieures pour une étoile en accréation (voir Kaminker *et al.* (1999)). Une étoile à neutrons se forme avec des températures très grandes de l’ordre de 10^{11} K, puis se refroidit rapidement à des températures en dessous de 10^8 K. La température au sein d’une étoile à neutrons est donc typiquement inférieure à la température de cristallisation pour qu’une écorce solide puisse se former.

La composition des noyaux est voisine de celle des noyaux ordinaires dans les couches peu profondes d’une étoile à neutrons. A plus haute densité au contraire, les noyaux

contiennent une proportion très importante de neutrons. Le neutron à pression nulle est instable. Comme $m_n - m_p \simeq 1.3 \text{ MeV}$, il se désintègre en quelques minutes via l'interaction faible par réaction β



C'est pourquoi, il n'existe pas de neutrons libres en surface. En revanche, lorsque la densité est suffisante pour que l'énergie cinétique des électrons excède la différence de masse entre neutrons et protons, la réaction β est bloquée et électrons et protons se combinent en neutrons selon la réaction β inverse



Les noyaux sont ainsi de plus en plus riches en neutrons avec la densité. C'est donc l'interaction faible qui est à l'origine de la neutronisation des couches profondes et qui justifie le nom d'étoile à neutrons.

superfluides de neutrons

En descendant en profondeur, lorsque l'énergie de Fermi des électrons devient du même ordre de grandeur que l'énergie de liaison par nucléon du noyau, à une densité de l'ordre de

$$\rho_{\text{drip}} = \left(\frac{c}{\hbar}\right)^3 \left(\frac{m_\pi^3}{2m_p}\right)^2 \sim 10^{11} \text{ g/cm}^3 \quad (1.9)$$

certains neutrons s'échappent du noyau. Les calculs indiquent que ces neutrons s'apparient en paires de Cooper de la même façon que les électrons dans un supraconducteur ordinaire. Les noyaux sont alors immergés dans un gaz d'électrons et un superfluide de neutrons. La densité ρ_{drip} est légèrement supérieure dans le cas d'une étoile en accréation (voir Kaminker *et al.* (1999)).

mélange homogène de superfluides

A plus haute densité encore, au delà de la densité de saturation de l'ordre de

$$\rho_{\text{nuc}} = \left(\frac{c}{\hbar}\right)^3 m_\pi^3 m_p \sim 10^{14} \text{ g/cm}^3, \quad (1.10)$$

dans le manteau lorsque les noyaux sont dissous par la pression gravitationnelle et que électrons, protons et neutrons forment un mélange homogène, les neutrons représentent l'essentielle de la masse. En supposant que chaque type de particules forme un gaz de Fermi ultra relativiste $E_F = \hbar k_F c$, et en supposant que l'étoile est transparente aux neutrinos (les neutrinos s'échappent de l'étoile quelques secondes seulement après sa formation), l'équilibre β et l'électroneutralité se traduisent par $k_{F_n} = k_{F_p} + k_{F_e} = 2k_{F_p}$, soit en densités $n_n = 8n_p$. Autrement dit l'essentielle de la masse est contenue dans les neutrons.

Les calculs microscopiques suggèrent également que les neutrons sont superfluides et les protons supraconducteurs (voir Sauls (1989), pour une revue plus récente voir Bender *et al.* (2003)).

1.4.2 Structure

Une étoile à neutrons présente une structure stratifiée très riche. Nous pouvons distinguer principalement quatre régions (outre la magnétosphère qui entoure l'étoile) : la surface avec éventuellement une atmosphère, l'écorce solide, le manteau et le coeur.

magnétosphère

Une étoile à neutrons est le siège d'un champ magnétique très intense, de l'ordre de 10^8 Teslas¹ (à titre de comparaison le champ magnétique terrestre est de l'ordre de 10^{-5} Teslas ; les champs magnétiques accessibles en laboratoire peuvent atteindre de l'ordre de 100 Teslas). Le champ magnétique peut-être directement mesuré par l'observation du spectre en rayons X de pulsars (détection des résonances cyclotrons des électrons). Une étoile à neutrons en rotation est ainsi entourée d'une magnétosphère, responsable de l'émission d'ondes électromagnétiques pulsées, par rayonnement synchrotron de particules relativistes comme l'ont montré Goldreich & Julian (1969). Les pulsars millisecondes possèdent des champs plus faibles, de l'ordre de 10^5 Teslas, ce qui semble indiquer que ce sont des étoiles à neutrons âgées de milliards d'années, qui auraient été accélérées par accrétion dans des binaires (pulsars recyclés). D'un autre côté, le champ magnétique pourrait atteindre 10^{10} Teslas, voire plus dans la théorie des magnetars avancée par Duncan & Thompson (1992).

atmosphère

L'observation du rayonnement thermique (dans les rayons X) par les satellites Chandra (NASA) et XMM-Newton (ESA), qui succèdent à deux autres générations de satellites, respectivement Einstein et EXOSAT puis ASCA et ROSAT, permet d'obtenir des renseignements sur la température de surface, la composition chimique de l'atmosphère et le champ magnétique.

Une étoile à neutrons est probablement entourée d'une fine atmosphère dont l'épaisseur varie de quelques millimètres à quelques centimètres selon la température de l'étoile. L'énorme gravitation et le champ magnétique ont une influence profonde sur le transfert radiatif dans l'atmosphère et sur l'équation d'état. Les effets thermiques y jouent également un rôle important. L'atmosphère est probablement composée essentiellement d'hydrogène ionisé. Lorsque le champ magnétique est suffisamment fort ($\gtrsim 10^{10}$ Teslas pour une température de surface $T_s \sim 10^6$ K), la configuration énergétiquement la plus favorable, pourrait consister en une couche liquide ou solide d'hydrogène sans atmosphère comme l'a suggéré Ruderman (1971) (voir Lai (2001) pour une revue récente du sujet), ce qui pourrait expliquer l'absence de raies dans le spectre de RX J185635-3754 découverte par Walter *et al.* (1996), qui est l'une des plus proches et des plus brillantes étoiles à neutrons isolées (voir figure 1.5).

¹1T=10⁴ G

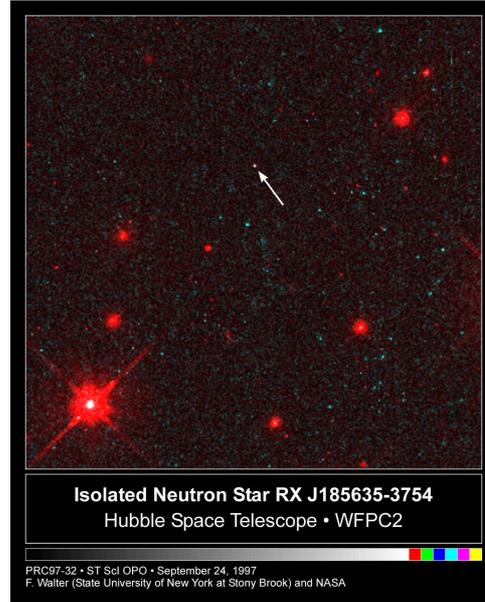


FIGURE 1.5 – Découverte d'une étoile à neutrons isolée, baptisée RXJ185635-3754 dans le domaine visible par le télescope spatial Hubble (NASA) par Walter & Matthews (1997).

surface

La surface de l'étoile pourrait être recouverte d'un océan de métal liquide ou d'un solide amorphe de noyaux de fer parce que la température y est voisine de la température de solidification d'un plasma $T \lesssim T_{\text{crist}}$. Ruderman (1971) a suggéré que la présence d'un champ magnétique de 10^8 T en surface pourrait donner lieu à des configurations d'atomes pour le moins inhabituelles en tubes ! Les effets thermiques et magnétiques sont de moins en moins prononcés en descendant plus en profondeur dans l'étoile.

écorce externe $10^6 \text{ g/cm}^3 \lesssim \rho \lesssim 10^{11} \text{ g/cm}^3$

L'écorce est formée d'un solide coulombien de noyaux sphériques dans un réseau cubique centré, en équilibre β avec un gaz d'électrons relativistes. Les noyaux sont de plus en plus lourds et enrichis en neutrons à mesure que la profondeur augmente. Jusqu'à une densité de l'ordre de 10^{11} g/cm^3 , tous les noyaux depuis le fer ${}^{56}_{26}\text{Fe}$ en surface à 10^6 g/cm^3 jusqu'à l'isotope ${}^{78}_{28}\text{Ni}$ du nickel à 10^{11} g/cm^3 , existent également sur Terre ou en laboratoire (voir Haensel & Pichon (1994)). Au delà la composition des noyaux peut être extrapolée à partir des masses des noyaux existants.

écorce interne $4.3 \times 10^{11} \text{ g/cm}^3 \lesssim \rho \lesssim 10^{14} \text{ g/cm}^3$

Les noyaux deviennent perméables aux neutrons à une densité $\rho_{\text{drip}} \sim 4 \times 10^{11} \text{ g/cm}^3$. L'étude des propriétés nucléaires est délicate du fait que ce type de phase où les noyaux coexistent avec des neutrons libres, n'existe pas sur Terre (le neutron est instable à pression

nulle). De plus les noyaux qui existent sur Terre sont essentiellement symétriques en neutrons et en protons. Néanmoins l'étude des isotopes éloignés de la ligne de stabilité β et des noyaux à halo de neutrons fournit des indications précieuses sur le comportement de la matière nucléaire asymétrique. Les neutrons libres sont également supposés s'apparier en paires de Cooper qui forment une phase superfluide.

A l'interface avec le manteau, les noyaux sont soumis à de telles pressions, qu'ils pourraient être fortement déformés en cylindres ou en plaques. Selon certains modèles, une telle phase pourrait représenter jusqu'à 40% de la masse de l'écorce (voir Lorenz *et al.* (1993)). L'existence à plus hautes densités, d'une couche de bulles de neutrons dans un liquide nucléaire aurait également des conséquences importantes sur le refroidissement des étoiles de faible masse (voir Gusakov *et al.* (2004)).

manteau

Le manteau, dans le scénario standard, est formé d'un mélange homogène de neutrons, protons, électrons en équilibre β . De nouvelles particules peuvent apparaître lorsque le potentiel chimique des neutrons excède la masse « habillées »¹ de certaines particules.

coeur

Le coeur même d'une étoile à neutrons reste encore mal connu et reflète notre ignorance des états de la matière à des densités supérieures à la densité au sein des noyaux de l'ordre de 10^{14} g/cm³. C'est pourquoi plusieurs scénarios ont été envisagés, parmi lesquels nous pouvons citer :

★ hypéronisation de la matière

A très haute densité, le potentiel chimique des neutrons peut excéder la masse d'autres baryons. Cameron (1959) fut un des premiers à proposer ainsi que les hyperons pourraient être stables dans le coeur d'une étoile à neutrons. Cette hypothèse a été étudiée depuis par de nombreux auteurs avec des approches très différentes (Glendenning (1985), Schaffner & Mishustin (1996), Balberg *et al.* (1999), Baldo *et al.* (2000), Vidaña *et al.* (2000)). Néanmoins, de nombreuses incertitudes demeurent notamment en ce qui concerne les interactions entre les nucléons et les hyperons. Les données expérimentales sont limitées par le fait que dans les conditions terrestres les hyperons sont instables. Pérez García *et al.* (2002) ont récemment suggéré l'existence d'une phase solide formée d'un cristal d'hyperons.

★ condensation de mésons

Le coeur d'une étoile à neutrons pourrait également être baignée dans un condensat de Bose-Einstein de pions, comme l'ont suggéré Migdal (1971) (voir aussi Migdal (1972)), Sawyer (1972) et Scalapino (1972). Cependant, un condensat de kaons, proposé par Kaplan & Nelson (1986), semble à l'heure actuelle être plus probable.

★ transition vers un plasma quarks-gluons

¹Ce sont les masses des particules dans la matière nucléaire, qui sont en générale différentes des masses dans le vide.

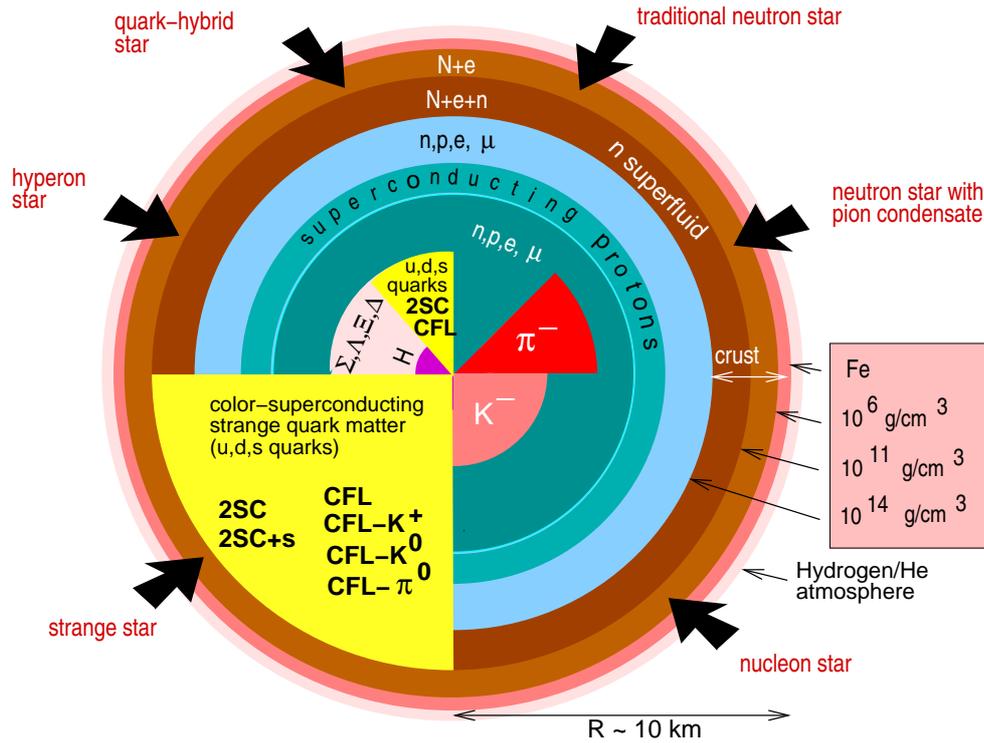


FIGURE 1.6 – Schéma illustrant les différentes structures d'une étoile à neutrons, par Weber (1999)

Il n'est pas impossible aussi, comme le firent remarquer Collins & Perry (1975), que la matière présente au centre d'une étoile à neutrons, soit si comprimée que les nucléons et les mésons fusionnent en une soupe de gluons et de quarks déconfinés.

Une possibilité encore plus exotique a été avancée par Bodmer (1971) selon laquelle il existerait des astres compacts, entièrement constitués de ce qu'il nomma des « noyaux effondrés », c'est-à-dire des noyaux beaucoup plus petits que les noyaux ordinaires et qui formeraient l'état le plus stable de la matière. Cet état serait cependant séparé de l'état ordinaire par une barrière de potentiel très grande, de telle sorte qu'il ne pourrait être atteint que dans des phénomènes astrophysiques de haute énergie. Cette idée fut développée indépendamment par Witten (1984), qui suggéra l'existence d'étoiles étranges, constituées de quarks u (*up*), d (*down*) et s (*strange*).

La structure d'une étoile à neutrons dans différents scénarios, est résumée sur la figure 1.6. Nous avons également rassemblé dans le tableau 1.2 quelques ordres de grandeurs.

Rayon	10 – 15 km
Masse	$\simeq 1.4 M_{\odot}$
Densité centrale	$\sim 10^{15} \text{ g/cm}^3$
Moment d'inertie	$\sim 10^{45} \text{ g.cm}^2$
Température	$< 10^{11} \text{ K}$
Champ magnétique	$\sim 10^8 \text{ T}$
Période de rotation	$1.56 \text{ ms} \leq P \leq 8.5 \text{ s}$
Ralentissement	$10^{-20} \leq \dot{P} \leq 10^{-12}$

TABLEAU 1.2 – Quelques ordres de grandeurs concernant les étoiles à neutrons typiques (pulsars)

Chapitre 2

Pulsars

Sommaire

2.1	Introduction	19
2.2	Origine des pulsars	20
2.3	Ralentissement des pulsars	26
2.4	Irrégularités de la période	28
2.5	Les sauts de fréquence comme sondes de la structure interne des pulsars	30

2.1 Introduction

Durant l'été 1967, une jeune étudiante Jocelyn Bell (Burnell) sous la direction d'Anthony Hewish à l'université de Cambridge, observe un signal radio qui se reproduit chaque jour ce qui exclut une origine terrestre. L'analyse de ce signal révèle une périodicité de 1.337 secondes. La très grande régularité du signal les conduit même à penser qu'il s'agit peut-être d'un signal artificiel, qu'ils nomment « LGM » pour « petits hommes verts » (*Little Green Men*), envoyé par une civilisation extraterrestre. Cette hypothèse est rapidement abandonnée lorsque Bell découvre une autre source de pulses dans une autre partie du ciel. Hewish, Bell et leurs collègues rapportent leurs découvertes de ces mystérieux *pulsars*¹ en 1968 dans *Nature*. Aujourd'hui, nous connaissons plus d'un millier de pulsars, essentiellement dans notre galaxie, référencés par l'acronyme *PSR* pour *Pulsating Source of Radio*, suivi d'une lettre qui désigne l'équinoxe (*B* pour celui de 1950, et *J* pour celui de 2000) et enfin l'ascension droite et la déclinaison du pulsar. Par exemple, le pulsar découvert par Bell est codé par PSR B1919+21, dont l'ascension droite est 19h19' et la

¹Il s'agit de la contraction de *pulsating stars* formulée par un journaliste scientifique du *Daily Telegraph* à Londres.

déclinaison $+21^\circ$. Les pulsars ont été observés depuis, non seulement dans le domaine radio, mais également dans le visible, les rayons X et γ .

2.2 Origine des pulsars

2.2.1 Données observationnelles

large gamme de période

Le pulsar de Bell et Hewish a une période de 1.337 secondes. Très rapidement de nouveaux pulsars ont été découverts, notamment en 1969 ceux qui seront les plus étudiés par la suite : le pulsar du Crabe (PSR B0531+21) dans la nébuleuse du même nom (premier objet du catalogue de Messier) et le pulsar de Véla (PSR B0833-45) dans la constellation des Voiles dont les périodes sont sensiblement plus petites, respectivement 33 ms et 89 ms. Aujourd'hui, les périodes des pulses sur l'ensemble des pulsars connus s'étalent de 1.56 ms pour PSR B1937+214 découvert par Backer *et al.* (1982), jusqu'à 8.5 s pour PSR J2144-3933 observé pour la première fois par Young *et al.* (1999).

une précision d'horloger

La période des pulses est extrêmement stable. Néanmoins, pour *tous* les pulsars, la période des signaux *augmente* avec le temps. Cette variation de la période est très faible, de seulement quelques dizaines de microsecondes par an au maximum, une précision comparable à celle des horloges atomiques notamment pour les pulsars millisecondes ! Les variations observées de la période sont comprises entre $10^{-20} < \dot{P} < 10^{-12}$, où

$$\dot{P} = \frac{dP}{dt}, \quad (2.1)$$

ce qui permet de définir un temps ou âge caractéristique du pulsar

$$\tau \equiv \frac{P}{\dot{P}}. \quad (2.2)$$

Pour le pulsar du Crabe, le ralentissement est $\dot{P} \simeq 4.2 \times 10^{-13}$ d'où $\tau \simeq 2 \times 10^3$ ans, ce qui est du même ordre de grandeur que le temps écoulé depuis l'observation d'une supernova par les Chinois en 1054 dans la nébuleuse du Crabe. L'âge caractéristique de Véla avec $\dot{P} \simeq 1.2 \times 10^{-13}$ est environ $\tau \simeq 2 \times 10^4$ ans. Les pulsars millisecondes, dont le ralentissement est très faible $\dot{P} \sim 10^{-20}$, ont des temps caractéristiques environ 10 millions de fois plus grands, soit $\tau \sim 10^{10}$ ans. Les pulsars du Crabe et de Véla sont donc relativement jeunes.

dispersion du signal

Les temps d'arrivée des pulses sont décalés selon leur fréquence : plus la fréquence est basse et plus les signaux sont retardés (voir la figure 2.2). Ceci traduit une dispersion du

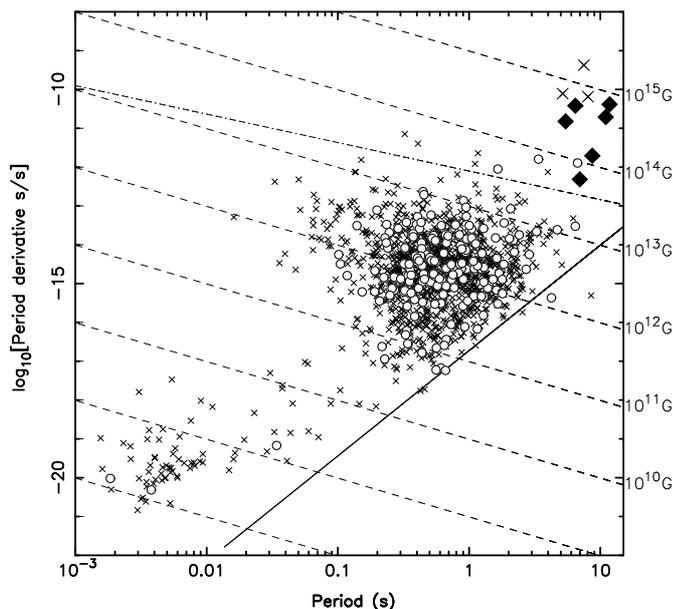


FIGURE 2.1 – Distribution des pulsars dans le plan $P - \dot{P}$ d'après Hobbs *et al.* (2004). Les diamants \blacklozenge indiquent les pulsars X anormaux (AXP), les croix larges \times les sources γ régulières (SGR), considérées comme des étoiles à neutrons fortement magnétisées baptisées magnétars. Les lignes pointillées marquent les lignes de champ magnétique constant (en Gauss) en supposant que le ralentissement d'un pulsar provient du rayonnement magnétique dipolaire.

signal du pulsar par les électrons du milieu interstellaire ce qui prouve que les pulsars sont des objets éloignés. Plus précisément, le temps d'arrivée du pulse est d'autant plus grand que la distance parcourue par le signal est grande. En mesurant ce décalage pour plusieurs fréquences, et en supposant connue la densité d'électrons dans le milieu interstellaire, il est possible de déduire la distance du pulsar. L'analyse des temps d'arrivée ne fournit pas directement la distance mais la mesure de dispersion, notée DM¹, définie par le produit de la distance du pulsar par la densité électronique moyenne le long de la ligne de visée.

La forme des pulses varie fortement sur des échelles de temps inférieures à la milliseconde, cependant la forme *moyenne* de plusieurs centaines de pulses est très stable. C'est une caractéristique propre à chaque pulsar. C'est par exemple en remarquant que la forme des pulses de PSR B1828-11 était instable et variait périodiquement, que Stairs *et al.* (2000) en ont récemment conclu que cette variation provenait d'une précession du pulsar.

distribution galactique

L'ensemble des pulsars se répartissent dans le plan de la Voie Lactée ce qui confirme leur origine galactique. Pour les pulsars les plus proches, il est possible de mesurer leur

¹DM est l'acronyme de *dispersion measure*.

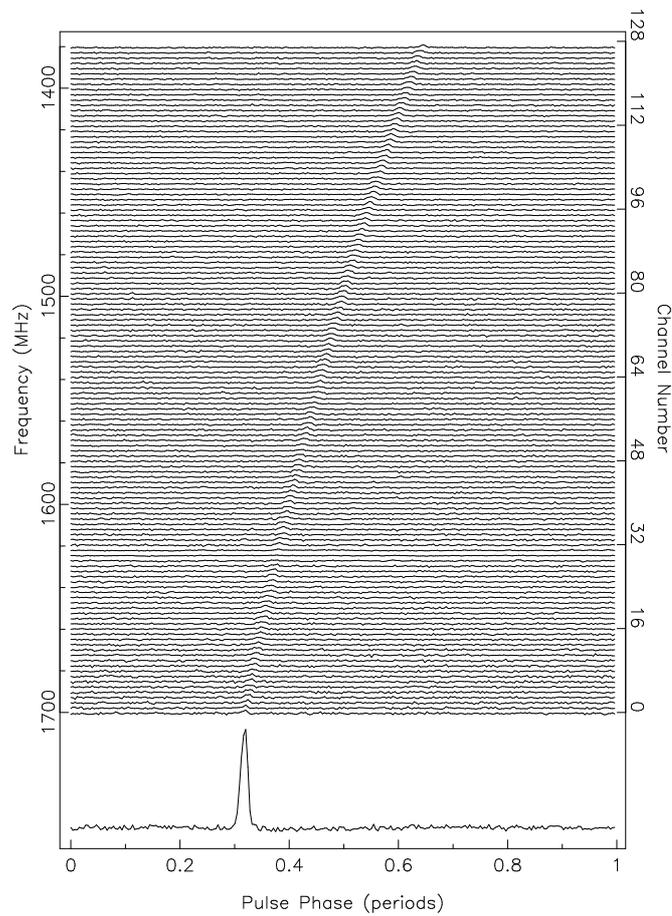


FIGURE 2.2 – Dispersion du signal du pulsar PSR B1933+16 en fonction de la fréquence (tous les 2.5 Mhz) d'après Wang *et al.* (2001). L'axe des abscisses représente les temps d'arrivée du pulse normalisés à la période du pulsar. Est également représentée la forme moyenne du pulse.

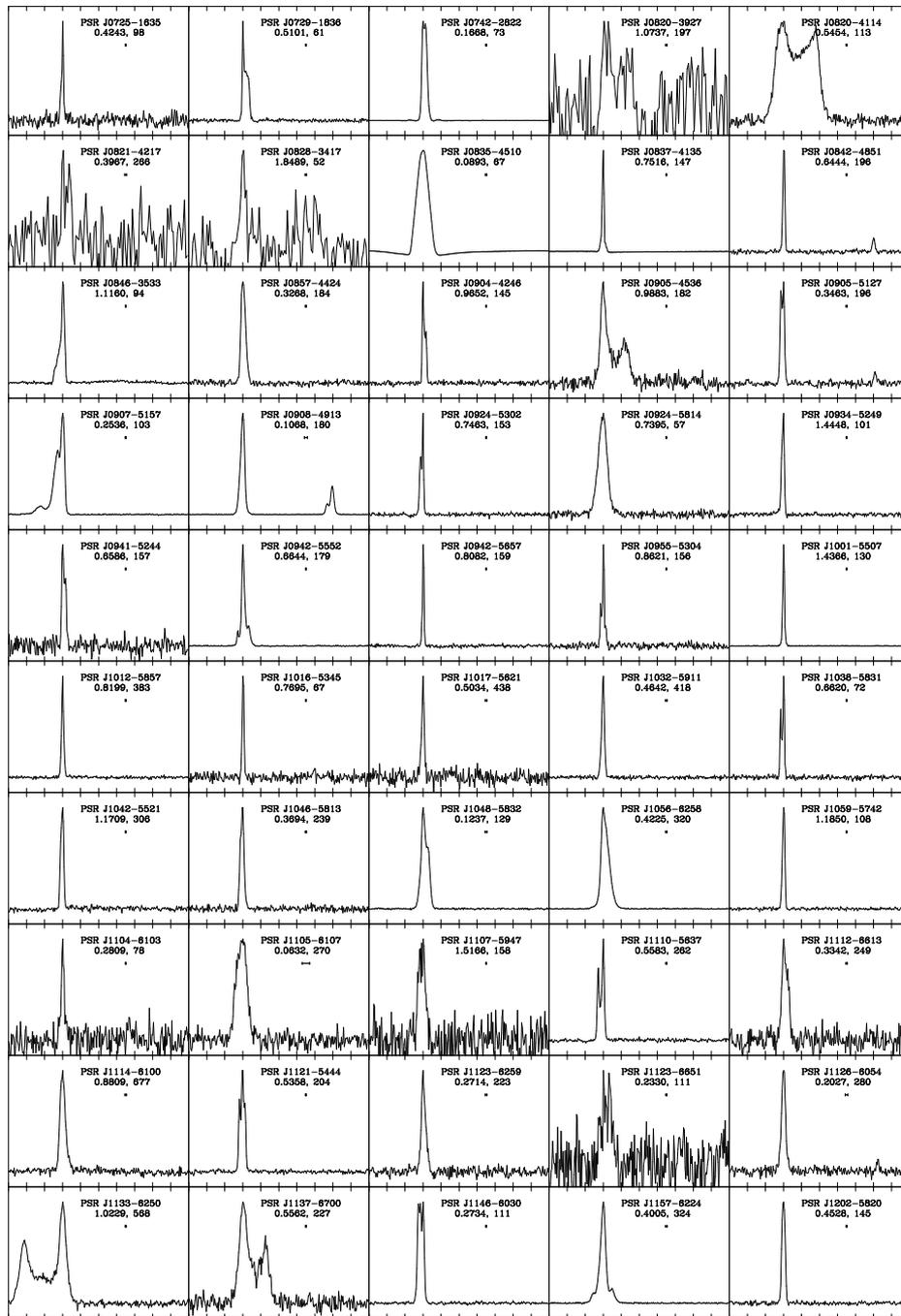


FIGURE 2.3 – Exemples de profils moyens de pulses récemment observés par Hobbs *et al.* (2004). Pour chaque pulse sont indiqués, le nom du pulsar, la période (s) et la mesure de dispersion ($\text{cm}^3 \cdot \text{pc}$).

distance directement par parallaxe. Les pulsars les plus proches de nous se situent à une centaine de parsecs, comme le pulsar Géminga (PSR J0633+1746) qui n'a été identifié comme tel qu'en 1992 grâce au satellite ROSAT¹ et dont la distance, environ 157 pc, a été mesurée avec précision par Caraveo *et al.* (1996) avec le télescope spatial Hubble. La distribution des pulsars est également proche de celle des résidus de supernovae.

2.2.2 Origine de la périodicité

Lorsqu'ils publient leurs résultats en 1968, Hewish et ses collaborateurs envisagent la possibilité d'oscillations d'une étoile à neutrons ou d'une naine blanche pour expliquer des variations aussi rapides du signal. D'autres hypothèses ont été avancées pour expliquer la périodicité des signaux comme des planètes par Burbidge & Strittmatter (1968), pour expliquer l'origine de ces pulsations. Deux ans auparavant Wheeler (1966) avait déjà proposé que la nébuleuse du Crabe était alimentée par une étoile à neutrons magnétisée et l'année suivante Pacini (1967) présentait le premier calcul détaillé. La découverte du pulsar du Crabe confirme également l'association entre supernovae et étoiles à neutrons, une prédiction vieille de plus de trente ans par les astronomes Walter Baade et Fritz Zwicky.

systeme binaire

Les périodes observées des pulses pourraient s'expliquer par un système de deux étoiles en rotation l'une autour de l'autre. Pour cela, il faudrait que la période orbitale soit au plus de l'ordre de la seconde. Pour des étoiles de la masse du soleil $M_1 \sim M_2 \sim M_\odot$, cela signifie d'après la troisième loi de Kepler

$$\frac{P^2}{a^3} = \frac{4\pi^2}{G(M_1 + M_2)}, \quad (2.3)$$

que ces étoiles sont distantes au plus de quelques milliers de kilomètres seulement ce qui exclut des étoiles normales (le soleil a un rayon de 7×10^5 km!). Seules des étoiles compactes pourraient donc être associées à des pulsars. Les naines blanches ont un rayon du même ordre que celui de la Terre ($R = 6400$ km), et sont par conséquent incompatibles avec les pulsars les plus rapides. Il ne reste donc que les étoiles à neutrons. Néanmoins cette interprétation prédit une *diminution* de la période du fait que les étoiles, en perdant de l'énergie (par rayonnement d'ondes gravitationnelles), se rapprochent l'une de l'autre jusqu'à la fusion, ce qui est contraire à l'observation de l'augmentation de la période. En outre, la durée de vie d'un tel système serait de quelques heures à quelques jours (voir Shapiro & Teukolsky (1983)). Il existe néanmoins des systèmes binaires de pulsars, qui émettent essentiellement dans le domaine des rayons X.

¹« Géminga » signifie « qui n'existe pas » en milanais, son origine étant longtemps restée mystérieuse.

oscillations d'étoiles

Les périodes d'oscillations des naines blanches sont bien trop grandes pour rendre compte des périodes des pulsars. Au contraire, les étoiles à neutrons qui sont environ cent millions de fois plus denses que les naines blanches, oscillent à des fréquences dix milles fois plus grandes¹. La fenêtre observée des périodes des pulsars et aussi leur très grande régularité cadrent difficilement avec ce type de modèle. Par ailleurs, la période d'un système oscillant *diminue* du fait de la dissipation d'énergie.

étoiles en rotation

La troisième possibilité pour l'origine des pulses est la rotation d'étoiles. La vitesse angulaire maximale de rotation d'une étoile autour d'elle-même est de l'ordre de

$$\Omega_K = \sqrt{\frac{GM}{R^3}} \quad (2.4)$$

(limite képlérienne), où R et M sont respectivement le rayon et la masse de l'étoile. Pour une naine blanche, comme Sirius B, la période minimum correspondante est environ 7 s, ce qui est bien trop grand pour expliquer les pulsars millisecondes. En revanche, pour une étoiles à neutrons dont la masse est de l'ordre de la masse du Soleil, la période est donc au minimum environ 10^{-4} s, ce qui est inférieure à la plus petite des périodes observées des pulses. Cette argument montre que les pulsars peuvent être associés à des étoiles à neutrons en rotation.

2.2.3 Origine des pulses

Goldreich & Julian (1969) ont montré qu'en raison de la rotation de l'étoile, le champ magnétique induit un champ électrique très intense en surface capable d'arracher des particules chargées. Ils en conclurent qu'un pulsar devait être entouré d'une magnétosphère, c'est-à-dire d'un plasma chargé. Les particules de ce plasma engendrent un faisceau de rayonnement synchrotron très focalisé selon la direction de l'axe des pôles magnétiques. Comme cet axe n'est en général pas aligné avec l'axe de rotation, le rayonnement de l'étoile nous parvient de façon périodique par pulses lorsque le faisceau intersecte la ligne de visée.

2.2.4 Associations entre supernovae et étoiles à neutrons

Les masses des pulsars qui ont pu être mesurées avec précision (voir figure 1.2) sont toutes proches de $1.4M_\odot$, or cette masse coïncide justement avec la limite de Chandrasekhar ce qui conforte l'hypothèse envisagée par Baade et Zwicky que les étoiles à neutrons sont les résidus de l'explosion d'étoiles en supernovae. Néanmoins jusqu'en 1986, sur plus

¹Dimensionnellement, la période d'oscillation est proportionnelle à $1/\sqrt{G\rho}$, où G est la constante de Cavendish et ρ la densité.

d'un millier de pulsars détectés depuis les premières observations de Bell et Hewish en 1967, seuls trois d'entre eux étaient associés à des restes de supernovae (voir Taylor & Stinebring (1986)) : les pulsars du Crabe, de Véla et de MSH 15-52 (PSR B1509-58). A l'heure actuelle, sur un peu plus de 200 supernovae identifiées dans notre galaxie, les observations indiqueraient seulement une dizaine d'associations avec des étoiles à neutrons (voir Manchester (1998)). Plusieurs arguments sont généralement invoqués pour expliquer cette anomalie : un pulsar ne peut être observé que si le jet intersecte la ligne de visée, l'âge caractéristique d'un pulsar est très supérieur devant la durée d'une supernova et enfin les pulsars reçoivent une impulsion lors de leur formation qui les éloigne de leur lieu d'origine.

2.3 Ralentissement des pulsars

2.3.1 Estimation de la température de surface

L'énergie cinétique de rotation d'un pulsar s'écrit

$$E = \frac{1}{2} I \Omega^2, \quad (2.5)$$

où I est le moment d'inertie. En ralentissant, le pulsar perd de l'énergie au rythme de

$$\dot{E} = I \Omega \dot{\Omega} = 2E \frac{\dot{\Omega}}{\Omega} < 0, \quad (2.6)$$

qui se traduit bien par une augmentation de la période de rotation donc des temps d'arrivée des pulses. En supposant que toute cette énergie est dissipée dans un rayonnement de corps noir, nous pouvons en déduire une estimation de la température maximale de surface T_s

$$T_s \lesssim \left(\frac{I \Omega \dot{\Omega}}{4\pi R^2 \sigma_B} \right)^{1/4}, \quad (2.7)$$

où σ_B est la constante de Stefan-Boltzmann. Pour les pulsars du Crabe et de Véla, $T_s \sim 10^7$ K. Les pulsars millisecondes sont des astres beaucoup plus froids, l'augmentation de leur période ne dépassant pas $\dot{P} \sim 10^{-20}$ pour certains, soit dix millions de fois plus faible que pour le Crabe ou Véla, leur température de surface est environ 100 fois plus faible. Cette estimation de la température de surface d'un pulsar suggère qu'il est possible que la température à l'intérieur de l'étoile soit inférieure à la température critique pour la superfluidité de la matière nucléaire.

2.3.2 Estimation du champ magnétique

Un des modèles les plus simples d'une étoile à neutrons magnétisée, consiste à représenter le pulsar par une étoile à neutrons sphérique de rayon R et de masse M en rotation

uniforme à la vitesse angulaire Ω et possédant un moment magnétique dipolaire incliné d'un angle α par rapport à l'axe de rotation. La variation dans le temps de ce dipôle magnétique se traduit par une perte d'énergie sous forme d'ondes électromagnétiques

$$\dot{E} = -\frac{4\pi B^2 R^6 \Omega^4 \sin^2 \alpha}{6\mu_0 c^3} < 0. \quad (2.8)$$

Le rayonnement électromagnétique implique un ralentissement du pulsar

$$\dot{\Omega} = -\frac{4\pi B^2 R^6 \sin^2 \alpha}{6I\mu_0 c^3} \Omega^3. \quad (2.9)$$

Inversement, la connaissance de la fréquence Ω et du ralentissement $\dot{\Omega}$ permet d'en déduire un ordre de grandeur pour le champ magnétique (en Teslas) d'une étoile à neutrons typique de rayon $R = 10$ km, de masse $M = 1.4 M_\odot$ et de moment d'inertie $I \simeq MR^2$

$$B \simeq 2 \times 10^8 \sqrt{\frac{P}{1 \text{ s}} \frac{\dot{P}}{10^{-15}}} \quad (2.10)$$

soit pour les pulsars du Crabe et de Véla le champ magnétique est $B \simeq 6 - 7 \times 10^8$ T, c'est-à-dire dix mille milliards de fois la valeur du champ magnétique terrestre !

2.3.3 Indices observationels

Le modèle du dipôle magnétique tournant prédit, d'après l'équation (2.9), une loi de décroissance pour la fréquence du type

$$\dot{\Omega} \propto -\Omega^n \quad (2.11)$$

avec $n = 3$. Il est donc naturel de définir un indice de freinage par

$$n \equiv \frac{\Omega \ddot{\Omega}}{\dot{\Omega}^2}. \quad (2.12)$$

La mesure de $\ddot{\Omega}$ est délicate, c'est pour cette raison que l'indice de freinage n'a été mesuré avec précision que pour quelques pulsars. Alors que l'indice de freinage du pulsar PSR 1509-58, $n = 2.83 \pm 0.03$ mesuré par Manchester *et al.* (1985), semble en assez bon accord avec le modèle du dipôle magnétique tournant, ce n'est plus le cas d'autres pulsars comme le Crabe $n = 2.509 \pm 0.001$ par Lyne *et al.* (1988) ou encore Véla pour lequel $n = 1.4 \pm 0.2$ selon Lyne *et al.* (1996). Ceci suggère un mécanisme de dissipation d'énergie plus complexe qu'un simple rayonnement dipolaire. D'ailleurs ce modèle n'explique pas la périodicité des signaux puisque le rayonnement est continu ! Il peut être également nécessaire, pour des étoiles possédant un moment quadrupolaire de masse, de tenir compte du rayonnement d'ondes gravitationnelles qui conduit à un indice de freinage $n = 5$ lorsque seule cette contribution est prise en compte. Le mécanisme détaillé du ralentissement des pulsars reste à l'heure actuelle encore mal connu.

2.4 Irrégularités de la période

La période d'un pulsar est extrêmement stable. Le ralentissement du pulsar se traduit par une augmentation de la période de seulement quelques dizaines de microsecondes par an au maximum, une précision comparable à celle des horloges atomiques ! Néanmoins, les signaux reçus par certains pulsars présentent des irrégularités.

2.4.1 Bruit de synchronisation

Une premier type d'irrégularités, appelée bruit de synchronisation ou *timing noise* est une fluctuation aléatoire des temps d'arrivée des signaux. Ce type de bruit est surtout présent dans les pulsars jeunes parce que le ralentissement y est plus important du fait du champ magnétique plus intense. Il est ainsi possible de mettre en évidence une corrélation entre le ralentissement \dot{P} et l'amplitude du bruit. Pour le pulsar du Crabe, par exemple, les variations sont de l'ordre de $|\Delta\Omega/\Omega| \ll 10^{-10}$. Ce type de bruit traduit l'existence de transferts aléatoires de moment cinétique entre l'intérieur fluide et l'écorce.

2.4.2 Sauts de fréquences

Un autre type d'irrégularités appelées *glitches* en anglais, plus rare que le précédent, est l'augmentation brusque de la fréquence $\Delta\Omega > 0$, suivie d'une relaxation de quelques jours dans les pulsars jeunes à plusieurs années dans les pulsars plus âgés. Le phénomène de relaxation peut s'expliquer simplement par de la friction entre l'intérieur fluide et l'écorce. L'observation de temps de relaxation très grands suggère que l'intérieur de l'étoile est superfluide. Les sauts de fréquence ont été observés pour la première fois dans les pulsars du Crabe et de Véla peu après leur découverte. Depuis, une centaine de ces sauts ont été observés dans une trentaine de pulsars (voir Krawczyk *et al.* (2003)). Ces sauts de fréquences restent néanmoins relativement faibles, puisque les augmentations de fréquences sont typiquement comprises entre $\Delta\Omega/\Omega \sim 10^{-9}$ (comme le pulsar du Crabe par exemple) jusqu'à $\Delta\Omega/\Omega \sim 10^{-6}$ (pulsar Véla). Le saut le plus important, $\Delta\Omega/\Omega \simeq 16 \times 10^{-6}$ a été récemment observé dans PSR J1806-2125 par Hobbs *et al.* (2002). Ces sauts de fréquence sont parfois marqués par un surfreinage du pulsar de l'ordre de $|\Delta\dot{\Omega}/\dot{\Omega}| \sim 10^{-5} - 10^{-4}$ dans le Crabe à $|\Delta\dot{\Omega}/\dot{\Omega}| \sim 10^{-3} - 10^{-2}$ dans Véla. La durée séparant deux sauts successifs est de l'ordre de quelques années. L'un des pulsars les plus actifs, est PSR J1341-6220 pour lequel douze sauts ont été découverts pendant 8.2 ans d'observation (voir Wang *et al.* (2000)). Une façon plus précise de mesurer l'activité de sauts d'un pulsar est de définir l'activité, selon McKenna & Lyne (1990), comme la variation relative de la période d'un pulsar induite par des sauts en une année. On constate alors que les pulsars les plus actifs ne sont ni les pulsars jeunes, ni les pulsars très âgés : ce sont ceux dont l'âge caractéristique est de l'ordre de 10^4 ans.

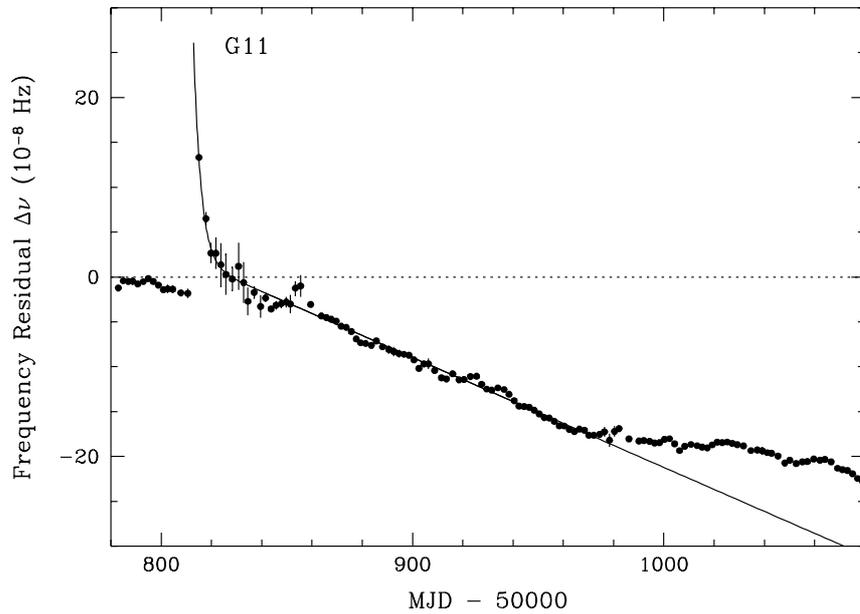


FIGURE 2.4 – Saut de fréquence observé dans le pulsar du Crabe d’amplitude $\Delta\Omega/\Omega \simeq 9 \times 10^{-9}$ par Wong *et al.* (2001)

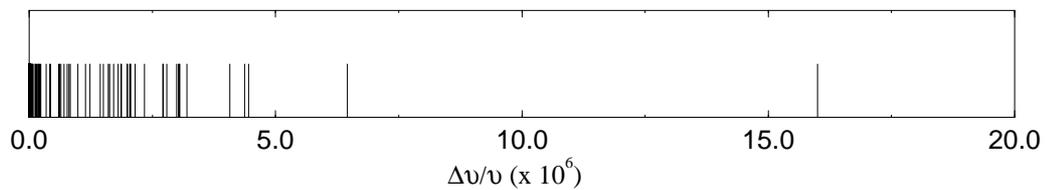


FIGURE 2.5 – Diagramme représentant les amplitudes de 97 sauts de fréquences dont le plus large, de l’ordre de 16×10^{-6} , a été récemment observée dans le pulsar PSR J1806-2125 par Hobbs *et al.* (2002)

2.5 Les sauts de fréquence comme sondes de la structure interne des pulsars

Les sauts de fréquence observés dans certains pulsars s'interprètent généralement comme des phénomènes survenant non pas dans la magnétosphère entourant le pulsar mais à l'intérieur même de l'étoile (voir par exemple Shapiro & Teukolsky (1983)). Dès les premières observations, Ruderman (1969) suggéra que le déclenchement de ces sauts de fréquence provenait du relâchement d'une contrainte solide fournissant ainsi une preuve indirecte de l'existence d'une composante solide, en l'occurrence d'une écorce. L'association des sauts de fréquence avec la superfluidité ¹ a été suggérée par Baym *et al.* (1969) en regard des temps de relaxation très longs, qui peuvent être de plusieurs années. Par ailleurs, l'étude théorique de la matière nucléaire conduit à l'existence de superfluides qui se trouve ainsi confirmée par l'observation des pulsars. La conductivité électrique à l'intérieur d'une étoile à neutrons étant très grande, l'écorce et les particules chargées dans le coeur sont couplées sur des échelles de temps de l'ordre de quelques secondes. L'idée est alors d'assimiler l'étoile à neutrons à un modèle à deux composantes : une région solide et un superfluide. Généralement, ces deux composantes sont identifiées par d'une part l'écorce solide couplée au plasma de particules chargées en rotation à la vitesse angulaire du pulsar, et d'autre part le superfluide de neutrons qui s'écoule dans l'écorce interne. Cependant, d'autres scénarios plus exotiques sont envisageables en considérant comme constituant solide, le coeur d'une étoile à neutrons formé d'un cristal d'hyperons comme cela a été suggéré par Pérez García *et al.* (2002)) ou d'un condensat de quarks dans une phase de type LOFF qui a été récemment avancé par Alford *et al.* (2001).

Les deux composantes sont supposées faiblement couplées de telle sorte que le ralentissement du superfluide est beaucoup plus lent que celui de l'écorce. C'est ainsi que se développe une rotation différentielle dans l'étoile jusqu'à un certain seuil au delà duquel une partie du moment cinétique du superfluide est brusquement transférée à l'écorce, ce qui se traduit par un saut de fréquence. L'aspect solide intervient dans le développement de contraintes qui sont brusquement relâchées au delà d'un seuil critique. Plusieurs sources de contraintes ont été évoquées comme le changement d'ellipticité, l'ancrage de tourbillons superfluides dans l'écorce ou le mouvement de tubes de flux magnétique dans le coeur.

2.5.1 Changement d'ellipticité

Peu après la découverte des premiers sauts de fréquences, Ruderman (1969) avança l'idée, que l'origine des sauts de fréquence serait due à un tremblement de croûte. Une étoile en rotation à la vitesse angulaire Ω n'est pas sphérique mais subit un aplatissement du fait des forces centrifuges. En supposant que la déformation est faible, le moment d'inertie est donné par

$$I = I_0(1 + \epsilon) \quad (2.13)$$

¹La superfluidité elle-même à l'intérieur des étoiles à neutrons a été prédite par Migdal dès 1959 sur la base de la théorie BCS de la supraconductivité élaborée par Bardeen, Cooper et Schrieffer en 1957.

où I_0 est le moment d'inertie d'une étoile sphérique en l'absence de rotation et $\epsilon \ll 1$. Cette approximation est justifiée puisque pour les pulsars du Crabe ou de Véla, l'applatissage est de l'ordre de $\epsilon \sim 10^{-4}$ (voir par exemple Shapiro & Teukolsky (1983)). La déformation ϵ est proportionnelle au carré de la vitesse angulaire Ω . Si l'étoile était complètement fluide, un ralentissement $\Delta\Omega$ du pulsar se traduirait par un réajustement $\Delta\epsilon$ de la forme de l'étoile vers une sphère et par suite une réduction du moment d'inertie

$$\Delta I = I_0 \Delta\epsilon = 2\epsilon I_0 \frac{\Delta\Omega}{\Omega}. \quad (2.14)$$

Du fait de la présence d'une écorce, la déformation de l'étoile n'est pas continue, elle est absorbée dans une augmentation des contraintes solides. Lorsque cette contrainte franchit un certain seuil critique, l'écorce se fracture soudainement et adopte la forme d'équilibre correspondante. La variation du moment d'inertie $\delta I \lesssim \Delta I$, provoque alors une brusque accélération de la croûte qui se traduit par un saut de fréquence dont l'amplitude, en supposant que le moment cinétique est conservé, est donnée par

$$\frac{\delta\Omega}{\Omega} = -\frac{\delta I}{I_0} \lesssim 2\epsilon \frac{\Delta\Omega}{\Omega}. \quad (2.15)$$

Dans les pulsars très jeunes dont les températures internes sont encore élevées (supérieures à 10^8 K), l'écorce présente des propriétés plastiques et ne peut donc accumuler de larges contraintes, ce qui explique la faible activité de ces pulsars.

Le ralentissement accumulé pendant l'intervalle de temps Δt entre deux sauts successifs est approximativement

$$\frac{\Delta\Omega}{\Omega} \simeq \frac{\dot{\Omega}}{\Omega} \Delta t = \frac{\Delta t}{\tau}, \quad (2.16)$$

où τ est l'âge caractéristique du pulsar. Ce modèle prédit donc une amplitude maximale des sauts de fréquence de l'ordre de

$$\left. \frac{\delta\Omega}{\Omega} \right|_{\max} \sim 2\epsilon \frac{\Delta t}{\tau}. \quad (2.17)$$

Pour le pulsar du Crabe l'âge caractéristique est de l'ordre de quelques milliers d'années et Δt de quelques années d'où $\Delta t/\tau \sim 10^{-3}$ et $\delta\Omega/\Omega \sim 10^{-7}$ ce qui est en accord avec les valeurs observées. En revanche, pour Véla avec $\tau \sim 10^4$ ans et Δt quelques années d'où $\Delta t/\tau \sim 10^{-4}$ et $\delta\Omega/\Omega \sim 10^{-8}$, ce modèle ne peut expliquer l'amplitude observée des sauts environ cent fois plus grands que ceux prédits par un tremblement de croûte. Par ailleurs avec des sauts tous les $\Delta t \simeq 3$ ans environ et dont l'amplitude observée est cent fois plus grande $\Delta\epsilon = \delta\Omega/\Omega \sim 10^{-6}$, l'ellipticité actuelle de Véla $\epsilon \sim 10^{-4}$ disparaîtrait en seulement $\epsilon\Delta t/\Delta\epsilon \sim 100$ ans soit 1% de l'âge du pulsar.

Le modèle de changement d'ellipticité, basé sur le seul aspect solide de l'intérieur d'un pulsar, ne peut donc expliquer à lui seul l'ensemble des observations. La compréhension des sauts de fréquence dans des pulsars de type Véla et l'interprétation des phénomènes de relaxation nécessite l'introduction de superfluides dans l'étoile.

2.5.2 Avalanche de tourbillons superfluides

Un superfluide a notamment les propriétés d'un fluide irrotationnel. Néanmoins, lorsqu'un superfluide est mis en rotation à la vitesse angulaire Ω_s , cette condition est localement violée à travers des défauts topologiques sous forme de lignes de tourbillons dont la densité surfacique n_V est déterminée selon la formule

$$n_V = \frac{2m\Omega_s}{h}, \quad (2.18)$$

où h est la constante de Planck et m la masse par particule du superfluide¹. En 1972, Richard Packard entrevoyait déjà le rôle possible de la superfluidité dans les sauts de fréquence dans un article précurseur, s'appuyant sur des expériences sur l'hélium-4 superfluide (He II), et constatant en particulier que

« In one experiments the number of quantized vortex lines (in a cylindrical container) was measured as a function of the container's angular velocity. It was found that on deceleration the lines did not disappear at the speeds expected from the equilibrium theory. »

pour finalement en conclure que

« The sudden speed changes observed in the Vela and Crab pulsars may be caused by transitions between metastable flow states in the superfluid interior of the star. »

Peu de temps après Anderson & Itoh (1975) élaboraient un modèle détaillé pour expliquer les sauts de fréquence. L'idée est que lorsque le pulsar ralentit, les tourbillons s'éloignent de l'axe de rotation de façon à diminuer leur densité surfacique. Cependant, certains tourbillons pourraient rester ancrés dans l'écorce, attachés en quelque sorte aux noyaux. Par conséquent, alors que la vitesse angulaire Ω de l'écorce continue de diminuer, le superfluide maintient la même vitesse de rotation $\Omega_s > \Omega$. Cette différence de vitesse induit une force radiale de type Magnus s'exerçant sur les tourbillons. Lorsque cette force excède la force d'ancrage, les tourbillons sont brusquement libérés vers l'extérieur. Cette avalanche catastrophique de tourbillons s'accompagne d'une diminution de la vitesse angulaire du superfluide $\delta\Omega_s < 0$ et par conservation du moment cinétique d'une accélération de l'écorce $\delta\Omega > 0$

$$\delta\Omega = -\frac{I_s}{I_c}\Delta\Omega_s, \quad (2.19)$$

où I_s est le moment d'inertie du superfluide et I_c le moment d'inertie effectif de l'écorce (incluant tous les constituants de l'étoile qui sont rigidement couplés à l'écorce sur des échelles de temps très courtes devant la durée des sauts). Typiquement, le moment d'inertie du superfluide ne représente que quelques pourcents du moment d'inertie de la croûte, $I_s \sim 10^{-2} - 10^{-3}I_c$, parce que les superfluides dans le coeur, qui représentent l'essentiel

¹Dans le scénario standard le superfluide est identifié aux neutrons libres dans l'écorce interne. La masse m par particule de superfluide est alors donnée par la masse d'une paire de Cooper donc $m = 2m_n$, où m_n est la masse du neutron.

de la masse de l'étoile, sont très fortement couplés à l'écorce (voir Alpar *et al.* (1984a)). Lorsque la force d'ancrage est suffisamment importante, l'écorce pourrait alors se fracturer avant même que les tourbillons ne se détachent. Ruderman (1976) a montré que ce modèle permet d'expliquer les sauts de fréquences observés dans le pulsar Véla par des tremblements de croûte.

Le phénomène de relaxation après un saut s'interprète dans le modèle de Alpar *et al.* (1984b) par la reptation des tourbillons, analogue au glissement des tubes de flux magnétique dans un supraconducteur de type II, qui a été étudié à la fois théoriquement et expérimentalement (voir par exemple Lévy (1997) pour une introduction). Par les fluctuations thermiques (l'effet tunnel quantique, important à basse température, a été considéré par Link *et al.* (1993)), les tourbillons ancrés dans l'écorce ont une certaine probabilité de se détacher des noyaux et de sauter d'un site à un autre. La force de Magnus qui s'exerce sur les tourbillons introduit une direction privilégiée de telle sorte qu'il existe un courant de tourbillons dirigé le long de cette force. Ce courant est d'autant plus important que la température est élevée. Dans les pulsars très jeunes, ce courant de tourbillons empêche l'accumulation de larges contraintes dans la croûte ce qui explique leur faible activité.

Dans le modèle de Alpar *et al.* (1993), une étoile à neutrons est analogue à un circuit électrique avec un condensateur, dans lequel les tourbillons jouent le rôle des porteurs de charge électrique. L'étoile est supposée formée de régions « résistives » (analogues aux fils électriques et aux plaques d'un condensateur), dans lesquelles il existe un courant continu de tourbillons, et des régions « capacitives » vides de tourbillons (l'espace entre les plaques du condensateur). Le déchenement d'un saut de fréquence s'interprète dans ce modèle comme une décharge de tourbillons à travers des régions capacitives : des tourbillons d'une région résistive se détachent brusquement et se déplacent vers une autre région résistive où ils se rattachent de nouveau. Le surfreinage observé dans certains pulsars comme le Crabe à la suite d'un saut de fréquence, s'explique par une réduction du moment d'inertie à travers la formation de nouvelles régions capacitives (voir Alpar *et al.* (1996)).

2.5.3 Mouvement de tubes de flux magnétique

Le modèle de l'avalanche catastrophique des tourbillons fournit une interprétation détaillée des sauts de fréquence et notamment des phénomènes de relaxation, mais reste très spéculatif. Ce modèle s'appuie en particulier sur l'analogie entre les tubes de flux magnétique dans un supraconducteur ordinaire et les lignes de tourbillons dans l'écorce d'une étoile à neutrons. Cependant il existe des différences importantes. En particulier, la taille des tubes dans un supraconducteur ordinaire, qui sont ancrés sur des défauts du solide, est très grande devant la distance entre les atomes, ce qui n'est pas le cas des tourbillons dans une étoile à neutrons. Le calcul des forces d'ancrage des tourbillons est donc nécessairement entâché de nombreuses incertitudes. Des études de Jones (1998) et Donati & Pizzochero (2003, 2004) suggèrent même que les tourbillons ne sont pas ancrés du tout dans l'écorce.

De plus, le modèle de l'avalanche des tourbillons implique une corrélation entre l'amplitude des sauts de fréquences et le temps écoulé entre deux sauts successifs. En effet,

on pourrait s'attendre à ce que la durée séparant deux sauts successifs soit beaucoup plus grande lorsque les contraintes accumulées dans la croûte sont entièrement relâchées dans des sauts de large amplitude au lieu d'être libérées en partie dans des sauts de faible amplitude. Or l'étude statistique récente de Wang *et al.* (2000) montre que de telles corrélations ne sont pas observées, ce qui semble indiquer que le déclenchement des sauts de fréquence est un phénomène local. Cette conclusion conforte le modèle proposé par Ruderman *et al.* (1998), selon lequel les sauts proviennent de tremblements de croûte induits par des distorsions du champ magnétique.

Dans le scénario standard (voir chapitre 1), le coeur d'une étoile à neutrons est formé d'un mélange homogène de neutrons, protons et électrons. Les protons s'apparient en paires de Cooper et forment un supraconducteur. En supposant que celui-ci est de type II, le flux magnétique à l'intérieur de l'étoile est quantifié en un ensemble de tubes dont la densité surfacique est donnée par la formule (à comparer avec l'équation (2.18))

$$n_{\Phi} = \frac{B}{\Phi_0}, \quad (2.20)$$

où

$$\Phi_0 \equiv \frac{h}{2e}, \quad (2.21)$$

est le quantum de flux. La forme de ces tubes est déterminée par la configuration du champ magnétique. Par ailleurs, les neutrons sont dans une phase superfluide comme dans l'écorce, mais d'une nature différente. La rotation du pulsar engendre un ensemble de lignes de tourbillons parallèles à l'axe de rotation. Ces lignes de tourbillons sont enchevêtrées dans d'innombrables tubes de flux (pour un pulsar comme Véla ou le Crabe, le nombre de tubes de flux est environ 10^{13} fois plus grand que le nombre de tourbillons!).

Suite au ralentissement du pulsar, les lignes de tourbillons s'éloignent de l'axe de rotation entraînant des tubes de flux dans leur mouvement et coupant même parfois certains tubes. La redistribution des tubes de flux se traduit par une modification du champ magnétique. Comme le champ magnétique à l'intérieur de la croûte est essentiellement gelé du fait des très hautes conductivités électriques, le mouvement des tubes de flux donne naissance à des contraintes dans l'écorce. Ces contraintes sont finalement relâchées par des tremblements de croûte dont les sauts de fréquence en sont la signature. Le surfreinage qui survient à la suite de certains sauts s'explique dans ce modèle par une tectonique des plaques d'origine magnétique. Les tremblements de croûte s'accompagnent de mouvements de plaques en surface (au sein desquelles le champ magnétique est piégé) qui modifient ainsi la configuration du champ magnétique. Le surfreinage s'interprète alors par une augmentation du champ magnétique ou de l'angle α du dipôle (voir Link *et al.* (1998) et Franco *et al.* (2000)), ce qui d'après les équations (2.8) et (2.9), accentue le rayonnement et donc le ralentissement du pulsar.

Le modèle de Ruderman *et al.* (1998) prédit que les pulsars de longue période ont une faible activité, indépendamment de leur âge, parce que les contraintes générées par les tubes de flux ne sont plus suffisantes pour déclencher de larges sauts de fréquence. Or de tels sauts de l'ordre de $\Delta\Omega/\Omega \sim 10^{-7} - 10^{-6}$ ont été récemment découverts (voir

Kaspi *et al.* (2000), Kaspi & Gavriil (2003) et Dall’Osso *et al.* (2003)) dans le pulsar X anormal¹ 1RXS J1708-4009 dont la période est de $P \simeq 11$ s. Des indices observationnels d’un saut de fréquence dans un autre pulsar X anormal ont été récemment rapportés par Morii *et al.* (2004). Par ailleurs, selon Link (2003) (voir également les références citées) l’existence de précession de longue période comme les observations du pulsar PSR B1828-11 le suggèrent, semble exclure la présence de supraconducteur de type II dans le coeur d’une étoile à neutrons. L’observation de sauts de fréquence dans ce type de pulsars ne pourrait donc pas s’expliquer par le modèle de Ruderman *et al.* (1998). Par ailleurs les travaux de Jones & Andersson (2001) indiquent que l’ancrage des tourbillons superfluides dans l’écorce est beaucoup trop faible pour donner lieu à des sauts de fréquences dans des pulsars en précession.

De nouvelles piste sont donc à explorer. Carter *et al.* (2000) ont montré que la simple existence d’une rotation différentielle entre l’écorce et un superfluide donnait naissance à des contraintes du même ordre de grandeur que celles induites par l’ancrage des tourbillons superfluides. En outre, ce mécanisme ne requiert aucune hypothèse sur la présence ou non de tourbillons superfluides et de tubes de champ magnétiques et pourrait donc être beaucoup plus générique que les modèles discutés jusqu’à présent. Leur estimation repose néanmoins sur un modèle simplifié dans lequel la croûte est décrite par un fluide parfait indépendant du superfluide. Une autre voie a été ouverte récemment par Andersson *et al.* (2004) qui ont suggéré qu’une instabilité de type Kelvin-Helmholtz dans un mélange de superfluides de neutrons et de protons couplés par des effets d’entraînement pourrait être à l’origine des sauts de fréquence.

¹Ces pulsars sont qualifiés d’anormaux parce que contrairement aux pulsars radios, l’énergie des pulses ne provient pas de l’énergie de rotation mais probablement d’un champ magnétique très intense de l’ordre de $10^{10} - 10^{11}$ Teslas.

Première partie

Etude macroscopique d'une étoile à neutrons

Chapitre 3

Formulation covariante de l'espace-temps newtonien

Sommaire

3.1	Introduction	39
3.2	Structure de l'espace-temps newtonien	43
3.3	Espace-temps de Newton-Cartan	52

Dans ce chapitre, nous allons développer une formulation quadridimensionnelle entièrement covariante de l'espace-temps newtonien. L'intérêt d'une telle formulation est double. D'une part celle-ci permet de faciliter la comparaison entre la mécanique newtonienne et la théorie de la relativité générale. D'autre part, celle-ci apporte un éclairage nouveau sur la théorie de Newton. En particulier, nous montrerons que le principe de relativité galiléenne peut s'interpréter comme une symétrie de jauge, analogue à la symétrie des équations de Maxwell en électromagnétisme. Comme en relativité générale, la gravitation peut-être incorporée dans la structure même de l'espace-temps (sa courbure). Dans ce cas, le principe de relativité peut être étendu à des transformations plus générales que les transformations de Galilée, qui furent mises en évidence par Milne.

3.1 Introduction

3.1.1 Des notions de temps et d'espace à l'espace-temps

La perception de solides fixes indéformables (à notre échelle) a été à l'origine de la fondation de la géométrie dans la Grèce Antique. Parallèlement, l'observation des changements dans la Nature, et la recherche de leurs causes a conduit à l'élaboration de lois physiques. Jusqu'aux travaux de Newton, le mouvement d'un corps était défini par sa

relation avec son environnement proche. Pour Newton au contraire, la position et le mouvement d'un objet doivent être pensés dans un espace intrinsèque, « absolu », qui n'est rattaché à aucun autre corps et à l'intérieur duquel s'applique la géométrie euclidienne. Dans la théorie de Newton, l'étude des mouvements d'un objet permet d'en déduire les causes, c'est-à-dire les forces qui s'exercent sur cet objet par le principe fondamental de la dynamique. La détermination du mouvement nécessite au préalable la définition du temps.

La notion de mesure du temps s'est forgée par l'observation de phénomènes cycliques, comme l'alternance du jour et de la nuit, les phases de la lune ou le rythme des saisons. Les Hommes ont ainsi été amenés à construire des instruments pour suivre ces événements et les transcrire dans des calendriers. Pour Aristote, le temps est la mesure du changement. Comme le mouvement circulaire uniforme tient une place privilégiée, il apparaît alors naturel de mesurer le temps par l'observation des mouvements de la voûte céleste. En outre le temps est le même partout à la fois. Cette notion du temps sera reprise par Newton.

Jusqu'au début du XX^{ème} siècle, les notions de temps et d'espace apparaissaient bien distinctes, même si certains évoquaient dès le XVIII^{ème} siècle le temps comme une quatrième dimension.

Ce n'est qu'avec les travaux d'Einstein que les notions de temps et d'espace ont été complètement bouleversées. L'espace et le temps se sont retrouvés intimement liés. Ce lien entre temps et espace se manifeste par l'existence d'une constante fondamentale, qui s'avère être la vitesse de la « lumière », permettant de traiter le temps sur un même pied d'égalité que les trois coordonnées spatiales et de définir ainsi une distance dans l'espace-temps. Le concept même d'espace-temps a été introduit par Minkowski. Néanmoins avec la relativité restreinte, il restait encore un absolu, c'était l'espace-temps lui-même. Cette dernière barrière sera franchie avec l'élaboration de la relativité générale.

3.1.2 De la relativité restreinte à la relativité générale

La théorie de la relativité restreinte fut proposée par Einstein en 1905 de façon à réconcilier la mécanique classique de Newton avec la théorie de l'électromagnétisme au sein d'un même cadre, en postulant l'invariance de la vitesse de la lumière pour tous les observateurs, comme le suggéraient les expériences de Michelson et Morley. Cette hypothèse fondamentale était néanmoins en flagrante contradiction avec la loi de composition classique des vitesses déduite du principe de relativité énoncé par Galilée, qui établissait l'équivalence des observateurs en translation rectiligne uniforme les uns par rapport aux autres. Par ailleurs, la vitesse de la lumière apparaissait comme une vitesse limite fondamentale de la théorie. Il devenait alors évident que les concepts d'espace et de temps absolus qui soutenaient la mécanique classique, devaient être complètement repensés. Il découlait notamment de la théorie de la relativité restreinte que l'espace et le temps ne sont pas universels mais sont des notions relatives à chaque observateur. La théorie établissait également l'équivalence d'une nouvelle classe d'observateurs inertiels, associés non plus à des transformations de Galilée mais à des transformations de Lorentz.

De plus, le statut particulier conféré à la vitesse de la lumière conduisait à définir naturellement une distance spatio-temporelle dans un espace-temps à quatre dimensions, l'espace-temps de Minkowski, dont la géométrie était fondamentalement différente de la géométrie Euclidienne (il est néanmoins possible de définir une distance euclidienne à condition de considérer le temps non plus comme une variable réelle mais comme une variable complexe, imaginaire). Le temps était ainsi fusionné à l'espace au sein d'un nouvel espace géométrique, dont l'invariance par rotation était reflétée par l'équivalence des observateurs inertiels. La théorie de relativité restreinte conduisait ainsi à reformuler les lois physiques comme des relations entre des quantités géométriques d'un espace à quatre dimensions.

La théorie de la relativité restreinte parvenait ainsi à unifier mécanique classique et électromagnétisme en abandonnant les concepts d'espace et de temps absolus. La mécanique classique apparaissait alors comme un cas limite de la nouvelle théorie lorsque les vitesses en jeu sont très petites devant la vitesse de la lumière. Néanmoins, cette théorie n'était pas encore complètement satisfaisante, d'une part parce qu'elle ne traitait pas le cas de la gravitation et d'autre part parce que l'espace-temps lui-même restait absolu. Einstein fut ainsi amené après une dizaine d'années de recherches à généraliser la théorie de la relativité restreinte.

3.1.3 Structure de l'espace-temps d'Einstein

L'espace-temps en relativité générale n'est pas fixée *a priori* mais possède certaines propriétés. C'est une variété différentiable de dimension 4 munie d'une métrique $g_{\mu\nu}$ de signature lorentzienne $(-+++)$, qui s'interprète comme le champ de gravitation (voir l'annexe A pour un rappel succinct de topologie et de géométrie différentielle). La relativité générale est donc une théorie métrique de la gravitation. L'espace-temps possède une connexion $\Gamma_{\mu\nu}^{\rho}$, qui est la connexion métrique, c'est-à-dire qu'elle est de torsion nulle $\Gamma_{[\mu\nu]}^{\rho} = 0$ et préserve la métrique $\nabla_{\mu}g_{\mu\nu} = 0$. La connexion est alors simplement donnée par les symboles de Christoffel

$$\Gamma_{\mu\nu}^{\rho} = \frac{1}{2}g^{\rho\sigma}(\partial_{\mu}g_{\nu\sigma} + \partial_{\nu}g_{\mu\sigma} - \partial_{\sigma}g_{\mu\nu}). \quad (3.1)$$

La trajectoire d'une particule test, c'est-à-dire d'une particule dont les effets sur le champ gravitationnel sont négligeables, est une géodésique de l'espace-temps. Aucun observateur n'est privilégié, ce qui se traduit mathématiquement par la covariance des lois physiques, c'est-à-dire l'invariance par *n'importe quel* changement de coordonnées x^{μ} . Les lois physiques doivent donc être écrites sous forme tensorielle. Nous verrons dans la suite que cette condition à elle seule n'est physiquement pas très restrictive puisque nous montrons comment exprimer les lois de la mécanique classique de Newton sous forme covariante, comme en relativité restreinte ou générale. Le principe de covariance exprime seulement le fait que les lois physiques sont des relations entre des quantités géométriques. Il est nécessaire d'introduire d'autres principes, comme le principe d'équivalence en relativité générale ou le principe de relativité galiléenne en mécanique classique, pour préciser la structure de l'espace-temps dans lequel sont définies ces quantités géométriques.

Le champ gravitationnel, donc la structure de l'espace-temps, est déterminé par la matière-énergie¹ caractérisée par un tenseur symétrique, le tenseur énergie-impulsion $T_{\mu\nu}$, à travers les équations d'Einstein (sans constante cosmologique)

$$G_{\mu\nu} = \frac{8\pi G}{c^4} T_{\mu\nu} \quad (3.2)$$

où $G_{\mu\nu}$ est un tenseur symétrique définie en termes du tenseur de Ricci $R_{\mu\nu}$ et de la courbure scalaire R par

$$G_{\mu\nu} \equiv R_{\mu\nu} - Rg_{\mu\nu}. \quad (3.3)$$

$G_{\mu\nu}$ et $T_{\mu\nu}$ sont tous deux de divergence nulle. Le tenseur énergie-impulsion $T_{\mu\nu}$ représente le flux de la 4-impulsion p_μ à travers une 3-surface de covecteur normal Σ_ν . Nous pouvons le déterminer en utilisant le principe d'équivalence d'Einstein selon lequel les lois de la relativité restreinte restent valables dans un référentiel localement inertiel, caractérisé par les conditions

$$g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu}, \quad \partial_\rho g_{\mu\nu} = 0, \quad (3.4)$$

dans lesquelles $\eta_{\mu\nu}$ est la métrique de l'espace-temps minkowskien

$$\eta_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -c^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

en faisant explicitement apparaître la vitesse c de la lumière². Autrement dit nous pouvons toujours trouver localement un référentiel dans lequel les effets de la gravitation disparaissent : c'est l'observateur en chute libre.

Dans les années 1930, Élie Cartan (1923, 1924, 1925) et Kurt Otto Friedrichs (1927) (pour une revue, voir Trautman (1966), Havas (1964) et les références citées), à la lumière de ces nouvelles idées, ont ainsi proposé de reformuler de façon géométrique la théorie de Newton.

De la relativité restreinte et de la relativité générale, il apparaît que la vitesse de la lumière n'est pas seulement la vitesse de propagation des ondes électromagnétiques mais est une constante universelle, caractéristique des espaces-temps lorentziens (voir Ellis & Uzan (2003) pour une discussion sur ce point). Cette vitesse représente une vitesse maximale de propagation des interactions. Il devient alors naturel de définir la limite newtonienne de la relativité générale, comme la limite $c \rightarrow +\infty$ (actions instantannées).

Nous pouvons d'ores et déjà entrevoir que la métrique covariante $\gamma_{\mu\nu}$ est singulière dans cette limite. Nous verrons que ceci traduit le fait que la décomposition entre temps et espace n'est pas unique. Par contre la métrique inverse contravariante $\gamma^{\mu\nu}$ tend vers une limite bien définie

$$\gamma^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \gamma^{ij} \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

¹La masse n'est qu'une forme d'énergie par la formule célèbre d'Einstein $E = mc^2$.

²Dans ce cas, la coordonnée $x^0 = t$ est homogène à un temps et non à une distance comme en relativité où $x^0 = ct$.



FIGURE 3.1 – Elie Cartan (1869-1951)

où γ^{ij} est la métrique spatiale.

3.2 Structure de l'espace-temps newtonien

Dans l'espace-temps newtonien (voir par exemple Trautman (1966), Torreti (1996)), les mesures de longueur et de durée sont les mêmes pour tous les observateurs, indépendamment de leur état de mouvement, de leur position ou de l'époque à laquelle s'effectue la mesure. En ce sens, le temps et l'espace sont « absolus ». Chaque observateur, équipé d'une horloge mesurant le temps universel t , peut-être muni d'un référentiel formé de trois axes perpendiculaires (qui s'étendent à l'infini) lui permettant de repérer la position d'un point dans l'espace par trois nombres réels $X^i \in \mathbb{R}$ avec $i = 1, 2, 3$: ce sont les coordonnées cartésiennes de ce point. Un événement est ainsi caractérisé par la donnée de quatre nombres réels, les coordonnées spatiales et l'instant auxquels il se produit.

Du point de vue géométrique, l'existence d'un temps universel ou « absolu » dans l'espace-temps newtonien \mathcal{N} à quatre dimensions se traduit par l'existence d'une carte t , de $\mathcal{N} \mapsto \mathbb{R}$, qui à chaque point $p \in \mathcal{N}$ de l'espace-temps associe un nombre réel, $t\{p\} \in \mathbb{R}$. Cette carte permet de définir des hypersurfaces de l'espace-temps comme l'ensemble des points p qui sont tous associés au même temps t . Ces hypersurfaces de simultanéité $\mathcal{S}\{t\}$ ont toutes la même structure. Ce sont des variétés riemanniennes \mathbb{R}^3 (notre espace usuel) avec la métrique euclidienne γ^{ij} avec $i, j = 1, 2, 3$ de signature $(+++)$. Ces hypersurfaces sont plates pour la connexion métrique associée. Il existe un système de coordonnées privilégiées recouvrant toute la variété¹, ce sont les coordonnées cartésiennes X^i , telles que en tout point la métrique peut s'écrire sous la forme diagonale $\gamma^{ij} = \delta^{ij}$. Cette structure de l'espace-temps newtonien permet d'introduire un système de coordonnées quadridimensionnelles particulières x^μ où $\mu = 0, 1, 2, 3$ à partir des coordonnées cartésiennes X^i de l'espace. Ces coordonnées que nous appellerons par la suite aristotéliennes sont spécifiées par la carte de $\mathcal{S}\{t\} \mapsto \mathcal{N}$, $X^i \mapsto x^\mu$:

$$x^0 = t, \quad x^i = X^i. \quad (3.7)$$

¹Les coordonnées curvilignes ne sont pas définies partout. Par exemple en coordonnées sphériques $\{r, \theta, \phi\}$ l'angle ϕ n'est pas défini pour des points situés sur l'axe de coordonnée $z = r \cos \theta$

La composante x^0 est le résultat de la mesure du temps universel.

Pour résumer, l'espace-temps newtonien est un produit direct $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ d'un espace euclidien à trois dimensions \mathbb{R}^3 et d'un espace \mathbb{R} à une dimension associé au temps¹. L'espace-temps newtonien est donc topologiquement équivalent à \mathbb{R}^4 comme l'espace-temps min-kowskien (en relativité générale, l'espace-temps est seulement *localement* équivalent à \mathbb{R}^4 d'après le principe d'équivalence).

3.2.1 Principe de relativité

La structure de l'espace n'est pas modifiée si l'observateur se déplace avec son référentiel *sans le déformer* (sinon une contraction ou une dilatation des axes altèreraient la mesure des distances)². Ces coordonnées aristotéliennes ne sont donc pas uniques. Considérons un tel autre observateur aristotélien en mouvement par rapport au précédent, qui dispose d'une horloge mesurant le temps \check{t} et qui repère la position d'un point dans l'espace par des coordonnées cartésiennes \check{X}^i . Puisque le temps est universel, n'importe quelle horloge mesure les mêmes durées (simultanéité) donc

$$\check{t} = t \quad (3.8)$$

modulo un choix d'unités de temps³ et d'origine (et en supposant que le temps mesuré par les deux horloges varie dans le même sens). Cet observateur est équivalent au précédent s'il mesure les mêmes longueurs. Les nouvelles coordonnées \check{X}^i doivent donc préserver la métrique euclidienne de l'espace, autrement dit

$$\frac{\partial \check{X}^k}{\partial X^i} \frac{\partial \check{X}^l}{\partial X^j} \delta_{kl} = \delta_{ij}. \quad (3.9)$$

Les transformations spatiales dans $\mathcal{S}\{t\}$ qui préservent la métrique cartésienne sont l'ensemble des rotations de matrice $\Lambda_j^i\{t\}$ et translations par un vecteur $c^i\{t\}$ (groupe des déplacements à trois dimensions) :

$$\check{X}^i = \Lambda_j^i\{t\} X^j - c^i\{t\}. \quad (3.10)$$

A priori les transformations spatiales ne sont pas identiques d'une section spatiale $\mathcal{S}\{t\}$ à une autre $\mathcal{S}\{t'\}$, c'est à dire que celles-ci peuvent dépendre du temps. L'ensemble de ces observateurs aristotéliens, en mouvement (rotation, translation) les uns par rapport aux autres, forme la structure aristotélienne de l'espace-temps newtonien.

Galilée a été un des premiers à reconnaître que les lois physiques étaient identiques pour une certaine classe d'observateurs. Ses travaux ont été les prémices du principe de relativité formulé par Newton un siècle plus tard.

¹La structure en produit direct traduit le fait que temps et espace sont indépendants.

²Cela suppose l'existence de solides indéformables, ce qui n'est possible que si des actions se propagent instantanément.

³En relativité l'unité de temps est complètement fixée par le choix de l'unité de longueur divisé par la vitesse c de la lumière.

« Enfermez-vous avec un ami dans la plus vaste cabine d'un grand navire, et faites en sorte que s'y trouvent également des mouches, des papillons et d'autres petits animaux volants, qu'y soit disposé un grand récipient rempli d'eau dans lequel on aura mis des petits poissons; suspendez également à bonne hauteur un petit seau et disposez-le de manière à ce que l'eau se déverse goutte à goutte dans un autre récipient à col étroit que vous aurez disposé en dessous; puis alors que le navire est à l'arrêt, observez attentivement comment ces petits animaux volent avec des vitesses égales quel que soit l'endroit de la cabine vers lequel ils se dirigent; vous pourrez voir les poissons nager indifféremment dans toutes les directions; les gouttes d'eau tomberont toutes dans le récipient posé par terre; si vous lancez quelque objet à votre ami, vous ne devrez pas fournir un effort plus important selon que vous le lancerez dans telle ou telle direction, à condition que les distances soient égales; et si vous sautez à pieds joints, comme on dit, vous franchirez des espaces semblables dans toutes les directions. Une fois que vous aurez observé attentivement tout cela - il ne fait aucun doute que si le navire est à l'arrêt les choses doivent se passer ainsi - faites se déplacer le navire à une vitesse aussi grande que vous voudrez; pourvu que le mouvement soit uniforme et ne fluctue pas de-ci de-là, vous n'apercevrez aucun changement dans les effets nommés, et aucun d'entre eux ne vous permettra de savoir si le navire avance ou bien s'il est arrêté. »

Galilée, *Dialogue concernant les deux plus grands Systèmes du Monde*, 1632 (traduction issue de *Galilée, Newton lus par Einstein*, Françoise Balibar, Presse universitaire de France, 1990, p22-23).

La théorie de Newton suppose l'existence d'un espace « absolu ». Pourtant, les lois fondamentales de la dynamique permettent seulement de déterminer l'accélération « absolue » d'un corps mais pas sa vitesse « absolue »¹. Il est possible de contourner cette difficulté en abandonnant le postulat de l'espace « absolu » et en recherchant quels sont les référentiels dans lesquels s'appliquent les lois de la dynamique. S'il n'existait qu'un seul référentiel, nous pourrions identifier l'espace associé avec l'espace « absolu » de Newton. Or si un référentiel est tel que les lois de Newton sont vérifiées alors il en sera de même pour tout autre référentiel en translation rectiligne uniforme par rapport au précédent. La réponse est donc qu'il existe non pas un référentiel mais une infinité de familles de référentiels, que nous appellerons inertiels. Autrement dit tous les référentiels inertiels sont équivalents : c'est le principe de *relativité galiléenne* (qui sera généralisé par Einstein). Ludwig Lange et indépendamment James Thomson ont ainsi reformulé la théorie de Newton à la fin du XIX^{ème} siècle en termes de référentiels inertiels. Ces référentiels sont définis de telle sorte que le mouvement d'une particule libre est une ligne droite, qui balaye des distances égales en des temps égaux.

¹En supposant que ce corps soit un solide déformable. En effet il est impossible de déterminer le mouvement d'un solide rigide isolé dans l'espace « absolu » parce qu'il n'existe aucun point de référence : l'espace de Newton, qui n'est rien d'autre qu'un modèle de la géométrie euclidienne, est invariant par rotation et translation.

Les lois de la dynamique restent donc invariantes pour un sous ensemble d'observateurs aristotéliens, les observateurs inertiels en translation rectiligne uniforme les uns par rapport aux autres (la ligne d'univers d'un observateur inertiel est une droite dans l'espace-temps). Donc parmi toutes les transformations (3.10), seules les transformations de Galilée suivantes préservent les lois de la dynamique :

$$\check{X}^i = \Lambda_j^i X^j - c^i, \quad (3.11)$$

où Λ_j^i est une matrice orthogonale constante et c^i dépend linéairement du temps. Les transformations dans lesquelles la rotation spatiale dépend du temps sont exclues parce qu'elles donnent lieu à des forces d'inertie (de Coriolis, de d'Alembert et d'entraînement)¹.

La mécanique newtonienne en présence d'un champ de gravitation admet une classe plus générale d'observateurs inertiels qui sont accélérés, ainsi $b^i \equiv dc^i/dt$ n'est pas nécessairement constant mais peut dépendre du temps. Cette invariance a été mise en évidence par Edward Arthur Milne en 1934 suite aux travaux d'Einstein et en particulier à son principe d'équivalence. Considérons en effet un observateur enfermé dans la cabine d'une fusée, sans aucun hublot. Rien ne lui permet de distinguer la situation dans laquelle la fusée est encore dans son pas de tir sur Terre donc au voisinage d'un champ de gravitation, de la situation où la fusée est déjà dans l'espace loin de tout champ de gravitation et accélère (sans rotation).

3.2.2 Du caractère intrinsèquement covariant ou contravariant des tenseurs

La formulation de la mécanique classique repose traditionnellement sur une décomposition « 3 + 1 » entre espace et temps, c'est-à-dire sur le choix d'une structure aristotélienne particulière. Nous allons montrer qu'il est possible de construire une formulation quadridimensionnelle entièrement covariante de la mécanique classique et notamment de l'hydrodynamique. La première difficulté vient du fait que contrairement à l'espace-temps d'Einstein en relativité générale (ou même à l'espace-temps plat de Minkowski en relativité restreinte), il n'existe pas a priori de métrique quadridimensionnelle $\gamma^{\mu\nu}$, où $\mu, \nu = 0, 1, 2, 3$ puisqu'il n'existe pas de notion de distance spatio-temporelle. En relativité générale, l'espace-temps est une variété pseudo riemannienne, le champ de gravitation $g_{\mu\nu}$ déterminant une connexion dont les composantes sont les symboles de Christoffel $\Gamma_{\mu\rho}^{\nu} = g^{\nu\sigma}(g_{\sigma(\mu,\rho)} - \frac{1}{2}g_{\mu\rho,\sigma})$.

Cela implique en particulier que les tenseurs définis dans l'espace-temps newtonien ont une nature intrinsèquement covariante ou contravariante (il n'est pas possible de « monter » ou « descendre » les indices d'un tenseur). Cependant pour n'importe quelle section spatiale $\mathcal{S}\{t\}$, nous pouvons induire une « métrique » $\gamma^{\mu\nu} = f_{\star}\{\gamma^{ij}\}$ dans l'espace-temps par l'image directe (en anglais *pushforward*) de la métrique purement spatiale par

¹Ces forces sont souvent dénommées "pseudoforces" parce qu'elles sont uniquement liées au caractère non inertiel de l'observateur, par opposition aux interactions « fondamentales » que sont la gravitation, l'électromagnétisme, les interactions nucléaires faible et forte.

l'application $f : \mathcal{S}\{t\} \mapsto \mathcal{N}$, caractérisée en coordonnées locales par $x^\mu \{t, X^i\}$ avec $x^0 = t$ et $x^i = X^i$:

$$\gamma^{\mu\nu} = \gamma^{ij} x_{,i}^\mu x_{,j}^\nu \quad (3.12)$$

en notant

$$x_{,i}^\mu \equiv \frac{\partial x^\mu}{\partial X^i} \quad (3.13)$$

La métrique spatiale γ^{ij} est bien définie et possède un inverse γ_{ij} défini par $\gamma^{ik}\gamma_{kj} = \delta_j^i$. En revanche le tenseur $\gamma^{\mu\nu}$ n'est pas mathématiquement une métrique à proprement parler puisque son rang est égal à trois et non quatre. Nous continuerons cependant d'employer ce terme pour désigner ce tenseur.

Comme ce tenseur « métrique » est dégénéré, il admet un covecteur propre t_μ vérifiant

$$\gamma^{\mu\nu} t_\nu = 0 \quad (3.14)$$

Pusique par définition le temps t est constant sur la section spatiale $\mathcal{S}\{t\}$

$$\frac{\partial t}{\partial X^i} = 0, \quad (3.15)$$

il est facile de voir que le covecteur t_μ peut s'écrire sous la forme ¹

$$t_\mu = \frac{\partial t}{\partial x^\mu} \equiv t_{,\mu} \quad (3.16)$$

Autrement dit ce covecteur est simplement le gradient (1-forme) du temps universel t et caractérise les sections spatiales $\mathcal{S}\{t\}$ de l'espace-temps newtonien (covecteur orthogonal à l'hypersurface, c'est-à-dire au 3-espace ici).

Le tenseur $\gamma^{\mu\nu}$ et par suite t_μ ne dépend pas du choix d'une structure galiléenne ou de Milne. Pour le montrer, il suffit d'écrire le nouveau tenseur $\check{\gamma}^{\mu\nu}$ après un changement de référentiel inertiel, dans des coordonnées quelconques x^μ :

$$\check{\gamma}^{\mu\nu} = \check{\gamma}^{ij} \frac{\partial x^\mu}{\partial \check{X}^i} \frac{\partial x^\nu}{\partial \check{X}^j}. \quad (3.17)$$

Or $\check{\gamma}^{ij} = \gamma^{ij} = \delta^{ij}$ et en injectant les expressions des nouvelles coordonnées $\check{X}^i = \Lambda_j^i X^j - c^i$, les seules composantes non nulles de la nouvelle « métrique » dans les coordonnées $\{t, X^i\}$ sont

$$\check{\gamma}^{ij} = \frac{\partial X^i}{\partial \check{X}^k} \frac{\partial X^j}{\partial \check{X}^l} \delta^{kl} = \Lambda_k^i \Lambda_l^j \delta^{kl} = \delta^{ij} = \gamma^{ij}, \quad (3.18)$$

par définition des matrices de rotation Λ_j^i donc finalement

$$\check{\gamma}^{\mu\nu} = \gamma^{\mu\nu}. \quad (3.19)$$

¹Puisque t est un champ scalaire il n'est pas nécessaire de spécifier une dérivée covariante : $t_{,\mu}$ s'écrit simplement comme une dérivée partielle $t_{,\mu} = \partial_\mu t$

D'un autre côté, la métrique spatiale γ_{ij} (qui se réduit à δ_{ij} dans les coordonnées cartésiennes) induit une version covariante de la métrique dans l'espace-temps $\gamma_{\mu\nu}$ par l'image inverse (en anglais *pullback*) $\gamma_{\mu\nu} = g^*\{\gamma_{ij}\}$ par l'application $g : \mathcal{N} \mapsto \mathcal{S}$, qui à chaque point de l'espace-temps associe un point d'une section spatiale, les coordonnées $X^i\{x^\mu\}$ sont alors vues comme des champs scalaires dans la variété à quatre dimensions :

$$\gamma_{\mu\nu} = \frac{\partial X^i}{\partial x^\mu} \frac{\partial X^j}{\partial x^\nu} \delta_{ij}. \quad (3.20)$$

Cette métrique covariante $\gamma_{\mu\nu}$, tout comme $\gamma^{\mu\nu}$ est dégénérée donc il existe un vecteur propre e^μ tel que

$$\gamma_{\mu\nu} e^\nu = 0. \quad (3.21)$$

Puisque dans les coordonnées aristotéliennes $\{t, X^i\}$ les seules composantes non nulles de $\gamma_{\nu\mu}$ sont les composantes spatiales γ_{ij} , nous pouvons choisir comme vecteur propre le vecteur dont les composantes sont $e^0 = 1, e^i = 0$ c'est-à-dire normalisé tel que

$$e^\mu t_\mu = 1. \quad (3.22)$$

Contrairement à son homologue contravariant (3.12), ce tenseur métrique covariant de rang 3 n'est pas indépendant du choix d'un référentiel inertiel. Dans une transformation $X^i \mapsto \check{X}^i\{t, X^i\}$ de Galilée ou de Milne, le nouveau tenseur s'écrit dans des coordonnées quelconques x^μ

$$\check{\gamma}_{\mu\nu} = \frac{\partial \check{X}^i}{\partial x^\mu} \frac{\partial \check{X}^j}{\partial x^\nu} \delta_{ij}. \quad (3.23)$$

Ses composantes dans les anciennes coordonnées aristotéliennes $\{t, X^i\}$ sont donc d'après (3.11) :

$$\check{\gamma}_{ij} = \delta_{ij}, \check{\gamma}_{00} = b^2, \check{\gamma}_{0i} = -\Lambda_i^j b_j \quad (3.24)$$

avec $b^2 = \gamma_{ij} b^i b^j$ et $b_i = \gamma_{ij} b^j$. L'expression covariante de la transformation du tenseur $\gamma_{\mu\nu} \mapsto \check{\gamma}_{\mu\nu}$ s'écrit

$$\check{\gamma}_{\mu\nu} = \gamma_{\mu\nu} - 2t_{(\mu} \gamma_{\nu)\rho} b^\rho + b^2 t_\mu t_\nu, \quad (3.25)$$

où b^μ est simplement l'image directe de b^i par la carte $f : \mathcal{S} \mapsto \mathcal{N}, X^i \mapsto x^\mu$:

$$b^\mu = \frac{\partial x^\mu}{\partial X^i} b^i. \quad (3.26)$$

Ce quadrivecteur est donc purement spatial

$$b^\mu t_\mu = 0. \quad (3.27)$$

Comme le tenseur $\gamma_{\mu\nu}$ dépend du choix d'un référentiel inertiel, il en est de même pour son vecteur propre nul $e^\mu \mapsto \check{e}^\mu$. La transformation du vecteur propre s'obtient en imposant que

$$\check{\gamma}_{\mu\nu} \check{e}^\nu = 0. \quad (3.28)$$

Les nouvelles composantes dans les coordonnées aristotéliennes $\{t, X^i\}$ sont donc $\check{e}^0 = 1, \check{e}^i = \Lambda_i^k b_k$. Dans la suite, nous ne considérerons que des transformations de référentiel sans rotation des axes, c'est-à-dire $\Lambda_j^i = \delta_j^i$, pour alléger les notations. Dans ce cas, la transformation du vecteur propre devient simplement sous forme covariante

$$\check{e}^\mu = e^\mu + b^\mu. \quad (3.29)$$

En se plaçant dans les coordonnées aristotéliennes $\{t, X^i\}$, il est facile de voir que la contraction des « métriques » covariantes et contravariantes s'exprime comme

$$\gamma_{\mu\nu} \gamma^{\nu\rho} = \gamma_\mu^\rho \quad (3.30)$$

où le tenseur mixte γ_μ^ν est le projecteur spatial défini par

$$\gamma_\mu^\nu = \delta_\mu^\nu - e^\nu t_\mu. \quad (3.31)$$

Lors d'un changement de référentiel de type (3.11), ce tenseur se transforme comme

$$\check{\gamma}_\mu^\nu = \delta_\mu^\nu - b^\nu t_\mu. \quad (3.32)$$

3.2.3 Formulation covariante du principe de relativité

Le vecteur e^μ s'interprète comme la 4-vitesse d'un observateur inertiel par rapport à l'espace « absolu » ou « éther »¹. Nous pouvons ainsi reformuler sous forme covariante le principe de relativité sans faire appel aux changements de coordonnées dans la décomposition aristotélienne. En effet, le choix d'un vecteur de vitesse e^μ par rapport à l'éther, que nous désignerons plus simplement par vecteur d'éther, détermine le choix d'un référentiel inertiel. Nous pouvons alors définir un système de coordonnées privilégiées $\{t, X^i\}$, telles que dans ces coordonnées $e^0 = 1$ et $e^i = 0$ (système au repos par rapport au référentiel inertiel). Dans un changement de référentiel inertiel, le vecteur d'éther se transforme par définition comme

$$\check{e}^\mu \equiv e^\mu + b^\mu \quad (3.33)$$

où b^μ est un vecteur purement spatial, c'est-à-dire dont la composante temporelle est nulle $b^0 = 0$ dans les coordonnées $\{t, X^i\}$. De plus b^i ne dépend que du temps t . Dans les coordonnées $\{t, X^i\}$, le nouveau vecteur d'éther a pour composantes $\check{e}^0 = 1$ et $\check{e}^i = b^i$. Soient x'^μ les nouvelles coordonnées privilégiées telles que $\check{e}'^0 = 1$ et $\check{e}'^i = 0$. Or dans un changement de coordonnées $x^\mu = \{t, X^i\} \mapsto x'^\mu$, le vecteur d'éther se transforme comme

$$\check{e}'^\mu = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\mu} \check{e}^\mu, \quad (3.34)$$

d'où

$$1 = \frac{\partial x'^0}{\partial t} + b^j \frac{\partial x'^0}{\partial X^j}, \quad 0 = \frac{\partial x'^i}{\partial t} + b^j \frac{\partial x'^i}{\partial X^j}. \quad (3.35)$$

¹Dans la pensée aristotélienne, l'éther désigne la substance (quintessence ou cinquième élément après l'air, la terre, l'eau et le feu) qui compose la voûte céleste.

Le choix d'un vecteur d'éther est associé à une décomposition 3+1 de l'espace-temps. En identifiant la composante temporelle avec le temps universel $x'^0 \equiv \check{t} = t$ et en posant $x'^i \equiv \check{X}^i$ les nouvelles coordonnées privilégiées sont reliées aux anciennes coordonnées $\{t, X^i\}$ par les transformations de Galilée (ou de Milne) :

$$\check{t} = t, \quad \check{X}^i = \Lambda_j^i X^j - c^i, \quad c^i = \Lambda_j^i \int dt b^j \{t\} \quad (3.36)$$

où Λ_j^i est une matrice constante (indépendante de t et de X^i). En imposant par ailleurs que les nouvelles coordonnées \check{X}^i préservent la métrique euclidienne, la matrice Λ_j^i doit être orthogonale.

3.2.4 Principe de relativité comme l'invariance sous une symétrie de jauge

Le principe de relativité selon lequel les référentiels inertiels sont tous équivalents, se traduit dans le formalisme quadridimensionnel par le fait que les équations dynamiques ne doivent pas dépendre du choix d'un vecteur d'éther. Cette symétrie est analogue à l'invariance de jauge des équations de Maxwell de l'électromagnétisme dans une redéfinition du potentiel électromagnétique. C'est pourquoi nous parlerons de symétrie de jauge pour l'invariance de la mécanique newtonienne dans des transformations de Galilée ou de Milne, la jauge étant le vecteur d'éther. Il est important de distinguer cette invariance de jauge de la covariance. La covariance exprime l'invariance de forme d'une équation dans un changement de coordonnées quelconque. Un changement de référentiel inertiel ne se traduit pas par une transformation de type tensorielle. Une équation écrite sous forme covariante n'est donc pas nécessairement invariante de jauge. Lors de la formulation quadridimensionnelle de la mécanique newtonienne, il faut donc non seulement s'assurer de la covariance des équations dans n'importe quel changement de coordonnées (en écrivant des relations entre tenseurs de l'espace-temps) mais également de l'invariance galiléenne ou plus généralement de Milne.

3.2.5 Mesures de volume

Les sections spatiales $\mathcal{S}\{t\}$ possèdent une mesure de volume naturelle, le tenseur covariant complètement antisymétrique (une 3-forme donc), dont les composantes ε_{ijk} non nulles dans les coordonnées aristotéliennes sont égales à $\sqrt{\det\{\gamma\}}$ multiplié par le symbole de Lévi-Civita¹, et la version contravariante normalisée par $\varepsilon^{ijk} \varepsilon_{ijk} = 3!$. L'image directe du tenseur ε^{ijk} induit un tenseur complètement antisymétrique contravariant dans l'espace-temps :

$$\varepsilon^{\mu\nu\rho} = \varepsilon^{ijk} x_{,i}^{\mu} x_{,j}^{\nu} x_{,k}^{\rho}. \quad (3.37)$$

¹Le symbole de Lévi-Civita est égale à ± 1 selon que $\{i, j, k\}$ est une permutation respectivement paire ou impaire de $\{1, 2, 3\}$

Ce tenseur est donc purement spatial :

$$\varepsilon^{\mu\nu\rho}t_\rho = 0, \quad (3.38)$$

et invariant de jauge. Nous pouvons également introduire la mesure du 3-volume covariante $\varepsilon_{\mu\nu\rho}$ mais elle ne sera pas invariante sous des transformations de jauge.

Le covecteur t_μ permet de définir la 4-forme de volume de l'espace-temps $\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$ par

$$t_\mu = \frac{1}{3!}\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}\varepsilon^{\nu\rho\sigma}. \quad (3.39)$$

La version contravariante $\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$ est spécifiée par le choix de normalisation « relativiste » (dont la métrique a une signature Lorentzienne $(-+++)$)¹ suivant :

$$\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} = -4! \quad (3.40)$$

Avec cette définition, dans un système de coordonnées aristotéliennes $\varepsilon^{1230} = +1$ (donc $\varepsilon_{1230} = -1$) ou sous forme covariante

$$\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}t_\sigma = \varepsilon^{\mu\nu\rho}. \quad (3.41)$$

3.2.6 Connexion

Pour compléter la description de l'espace-temps newtonien, il nous faut maintenant préciser la connexion. Il n'est pas possible comme en relativité générale, de déterminer la connexion par la métrique puisque celle-ci est dégénérée. Néanmoins nous avons vu qu'il existait un système de coordonnées privilégié, les coordonnées aristotéliennes $\{t, X^i\}$ et nous pouvons donc choisir que les composantes de la connexion soient toutes nulles dans ces coordonnées. Dans ce cas la dérivée covariante ∇_μ se réduit simplement à une dérivée partielle ∂_μ . Puisque dans ces coordonnées les dérivées covariantes commutent $\nabla_\mu\nabla_\nu = \nabla_\nu\nabla_\mu$ cela reste vrai dans n'importe quel autre système. Par conséquent la connexion associée est celle d'un espace-temps plat. Dans un système de coordonnées quelconque x^μ , les composantes de la connexion ne sont pas nulles en générale et s'obtiennent par la relation de transformation (non tensorielle) de la connexion lors du changement de coordonnées $\{t, X^i\} \mapsto x^\mu$

$$\Gamma_{\mu\nu}^\rho = -t_\mu t_\nu \frac{\partial^2 x^\rho}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 x^\rho}{\partial t \partial X^i} \left(t_\mu \frac{\partial X^i}{\partial x^\nu} + t_\nu \frac{\partial X^i}{\partial x^\mu} \right) - \frac{\partial X^i}{\partial x^\mu} \frac{\partial X^j}{\partial x^\nu} \frac{\partial^2 x^\rho}{\partial X^i \partial X^j}. \quad (3.42)$$

La dérivée covariante définie avec cette connexion satisfait

$$\nabla_\mu \gamma^{\rho\sigma} = 0, \quad \nabla_\mu \gamma_{\rho\sigma} = 0, \quad \nabla_\mu t_\nu = 0, \quad \nabla_\mu e^\nu = 0, \quad \nabla_\mu \varepsilon^{\nu\rho\sigma\lambda} = 0, \quad \nabla_\mu \varepsilon_{\nu\rho\sigma\lambda} = 0. \quad (3.43)$$

Ces égalités sont facilement vérifiées en se plaçant dans les coordonnées aristotéliennes puisqu'alors la dérivée covariante est simplement une dérivée partielle et les tenseurs en

¹Nous avons choisi cette normalisation de façon à obtenir des expressions analogues aux expressions relativistes.

question sont constants. La connexion que nous avons définie est donc en particulier compatible avec la métrique (comme en relativité). L'égalité $\nabla_\mu t_\nu = 0$ traduit grossièrement que les sections spatiales sont plates puisque dans ce cas le covecteur normal t_ν est constant sur tout l'hyperplan. Signalons que la connexion peut se déduire d'une métrique de type Unruh $g_{\mu\nu} = \gamma_{\mu\nu} - C^2 t_\mu t_\nu$ par la formule de Christoffel (3.1), dans laquelle C est une constante arbitraire, qu'il peut être judicieux de choisir comme la vitesse du son dans l'étude des perturbations d'un milieu uniforme (voir Unruh (1995)).

Pour obtenir la transformation de jauge de la connexion, nous pouvons utiliser la relation de changement de coordonnées (3.42). Une autre méthode consiste à écrire que la nouvelle connexion doit préserver les nouveaux tenseurs de structure. Par exemple, puisque le tenseur t_ν reste invariant, la condition

$$\check{\nabla}_\mu t_\nu \equiv \partial_\mu t_\nu - \check{\Gamma}_{\mu\nu}^\rho t_\rho = 0 \quad (3.44)$$

implique que dans les coordonnées aristotéliennes $\{t, X^i\}$ les composantes $\check{\Gamma}_{00}^0 = \check{\Gamma}_{0i}^0 = \check{\Gamma}_{ij}^0 = 0$. De la même façon, la condition $\check{\nabla}_\mu \gamma^{\rho\sigma} = 0$ impose que $\check{\Gamma}_{jk}^i = 0$. Enfin, avec la condition $\check{\nabla}_\mu \check{e}^\nu = 0$ nous obtenons la seule composante non nulle de la nouvelle connexion $\check{\Gamma}_{00}^i = -db^i/dt$. Nous ne pouvons pas en déduire directement la transformation covariante de la connexion parce que cette dernière n'est pas un tenseur. En revanche, la différence entre deux connexions est un tenseur, en particulier $\check{\Gamma}_{\mu\nu}^\rho - \Gamma_{\mu\nu}^\rho$. Puisque la connexion $\Gamma_{\mu\nu}^\rho$ est nulle par définition dans les coordonnées $\{t, X^i\}$, nous avons finalement la loi de transformation de jauge

$$\check{\Gamma}_{\mu\nu}^\rho = \Gamma_{\mu\nu}^\rho - t_\mu a^\rho t_\nu \quad (3.45)$$

avec le vecteur accélération a^μ qui a pour composantes dans un référentiel aristotélien

$$a^0 = 0, \quad a^i = \frac{db^i}{dt}. \quad (3.46)$$

Ainsi la connexion est inchangée dans une transformation linéaire de Galilée ($a^\mu = 0$) et $\check{\nabla}_\mu = \nabla_\mu$. Dans une transformation accélérée, la connexion est modifiée mais sa trace reste invariante

$$\check{\Gamma}_{\nu\mu}^\mu = \Gamma_{\nu\mu}^\mu. \quad (3.47)$$

L'espace-temps newtonien est donc caractérisé par la « métrique » $\gamma^{\mu\nu}$, les tenseurs de mesure du 4-volume $\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$ et $\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$ et enfin par le covecteur t_μ , gradient du temps universel t . Ces tenseurs sont fondamentaux dans le sens où ils sont indépendants du choix d'une jauge (référentiel inertiel). Nous avons résumé de façon schématique la structure de l'espace-temps newtonien sur la figure 3.2.

3.3 Espace-temps de Newton-Cartan

En relativité générale, la gravitation fait partie de la structure même de l'espace-temps. Nous allons voir que la gravitation peut aussi être incluse dans la géométrie de l'espace-temps newtonien. Le nouvel espace-temps ainsi construit n'est alors plus plat mais possède

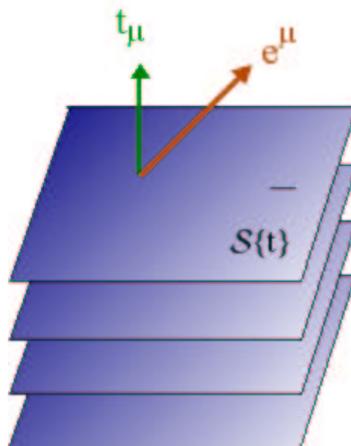


FIGURE 3.2 – Schéma illustrant le feuilletage de l'espace-temps newtonien en des 3-espaces parallèles.

une courbure (néanmoins les sections spatiales demeurent plates). La différence essentielle avec la relativité générale est que l'espace-temps de Newton-Cartan (Cartan (1923), Cartan (1924)) est en quelque sorte figé, statique. Sa structure est complètement déterminée par la matière (masse) présente, indépendamment de la dynamique des corps. En relativité générale au contraire, la géométrie de l'espace-temps est dynamique, en ce sens qu'elle dépend non seulement de la matière mais plus généralement de toute forme d'énergie (la masse n'étant d'une forme particulière d'énergie par la célèbre formule d'Einstein $E = mc^2$). Cela signifie que les équations régissant la dynamique des corps sont couplées aux équations du champ de gravitation.

3.3.1 Gravitation et symétrie de jauge

Considérons une particule ponctuelle soumise à la seule action d'un champ de gravitation g^μ qui est purement spatial,

$$t_\mu g^\mu = 0. \quad (3.48)$$

La trajectoire de cette particule s'obtient à partir du principe fondamental de la dynamique

$$\frac{d^2 X^i}{dt^2} = g^i \quad (3.49)$$

dans les coordonnées aristotéliennes et qui peut s'écrire sous forme covariante de la façon suivante :

$$u^\nu \nabla_\nu u^\mu = g^\mu \quad (3.50)$$

où nous avons introduit la quadrivitesse u^μ de la particule par

$$u^\mu = \frac{dx^\mu}{dt}. \quad (3.51)$$



FIGURE 3.3 – Edward Arthur Milne (1896-1950)

Cette équation est invariante sous des transformations de Galilée. En fait cette équation est invariante sous des transformations plus générales dans lesquelles les observateurs ne sont plus en translation uniforme mais accélérée. Deux observateurs accélérés l'un par rapport à l'autre, ne ressentiront simplement pas le même champ de gravitation. Autrement dit le champ de gravitation n'est pas indépendant du choix de jauge. Cette invariance a été mise en lumière par Edward Arthur Milne en 1934, suite aux travaux d'Einstein sur la relativité générale. Milne (1934) et McCrea & Milne (1934) ont montré qu'il était possible de construire un modèle cosmologique d'univers en expansion dans un cadre purement newtonien. Les équations régissant l'évolution de cet univers sont d'ailleurs identiques à leurs homologues en relativité générale (équations de Robertson-Walker) !

« It seems to have escaped previous notice that whereas the theory of the expanding universe is generally held to be one of the fruits of the theory of relativity, actually all the at-present-observable phenomena could have been predicted by the founders of mathematical hydrodynamics in the eighteenth century, or even by Newton himself. »

Edward Arthur Milne, 1934.

Considérons en effet un changement de référentiel accéléré, la quadrivitesse reste invariante par contre la connexion change d'où, en utilisant la normalisation $u^\mu t_\mu = 1$, nous avons

$$\nabla_\nu u^\mu \mapsto \nabla_\nu u^\mu - t_\nu a^\mu. \quad (3.52)$$

L'équation reste donc invariante si on admet que le champ de gravitation se transforme comme

$$g^\mu \mapsto \check{g}^\mu = g^\mu - a^\mu. \quad (3.53)$$

Nous souhaitons insister sur le fait que le champ de gravitation g^μ n'est physiquement pas bien défini puisqu'il dépend du choix d'une jauge. Ceci revient à dire que le champ de gravitation n'est donc pas défini de façon universelle comme peut l'être le temps par exemple, puisqu'il dépend de l'observateur qui le mesure. En particulier, nous pouvons choisir une jauge, spécifiée par la condition $a^\mu = g^\mu$ telle que le champ de gravitation sera nul dans cette jauge. Dans la vie courante, une telle situation se réalise pour un observateur en chute libre. Il aura l'impression de ne pas ressentir les effets de la gravitation. Il est

important de souligner que l'équation (3.53) n'est invariante sous des transformations de jauge que lorsque les observateurs sont en translation. Si un observateur est en rotation, l'équation ne garde pas la même forme parce qu'il apparaît des forces de Coriolis.

Le champ de gravitation s'obtient par la solution de l'équation de Poisson

$$\gamma^{\mu\nu}\nabla_\mu\nabla_\nu\phi = 4\pi G\rho, \quad (3.54)$$

où G est la constante de gravitation, ρ la densité totale de masse et ϕ le potentiel gravitationnel défini par

$$g^\mu = -\gamma^{\mu\nu}\nabla_\nu\phi. \quad (3.55)$$

La transformation de jauge du champ de gravitation se traduit par un changement de potentiel

$$\phi \mapsto \check{\phi} = \phi + \alpha, \quad (3.56)$$

où le champ α est donné par

$$\alpha = e^\nu\nabla_\nu\beta \quad (3.57)$$

en fonction du potentiel de poussée (*boost*) β défini de telle sorte que

$$b^\mu = \gamma^{\mu\nu}\nabla_\nu\beta. \quad (3.58)$$

Lorsque la masse de densité ρ est concentrée dans une région finie de l'espace, il existe un choix naturel de jauges qui sont telles que le potentiel de gravitation s'annule à l'infini. Seules les transformations de Galilée sont compatibles avec cette contrainte supplémentaire puisqu'alors $\alpha = 0$ et $a^\mu = 0$. C'est probablement pour cette raison, que l'invariance des équations de Newton dans des transformations de référentiels accélérés, est longtemps restée méconnue jusqu'aux travaux de Milne dans les années 1930.

Etant donnée une solution ϕ de l'équation de Poisson, le potentiel $\phi + \alpha$ est aussi une solution à condition que le nouveau champ scalaire α soit une solution de l'équation de Laplace

$$\gamma^{\mu\nu}\nabla_\mu\nabla_\nu\alpha = 0. \quad (3.59)$$

C'est effectivement le cas puisque cette équation (3.59) peut s'exprimer en terme de b^μ par

$$e^\rho\nabla_\rho\nabla_\mu b^\mu = 0, \quad (3.60)$$

qui est vérifiée puisque la vitesse b^μ est purement spatial et ne dépend que du temps t (sa divergence est donc nulle).

3.3.2 Connexion de Newton-Cartan

En fait il est possible d'absorber le champ de gravitation dans la structure de l'espace-temps, simplement en définissant une nouvelle connexion $\omega_{\mu\nu}^\rho$ définie par

$$\omega_{\mu\nu}^\rho = \Gamma_{\mu\nu}^\rho - t_\mu g^\rho t_\nu. \quad (3.61)$$

L'espace-temps correspondant n'est plus plat puisque les composantes de la connexion ne s'annulent plus dans les coordonnées aristotéliennes du fait de la présence du champ de gravitation. Plus précisément, dans ces coordonnées la seule composante non nulle de la connexion est $\omega_{00}^i = -g^i$. Ce qui montre que les sections spatiales sont toujours plates puisque $\omega_{ij}^k = \Gamma_{ij}^k = 0$, la courbure se manifestant uniquement dans *l'espace-temps*. Cette nouvelle connexion est invariante de jauge

$$\check{\omega}_{\mu\nu}^\rho = \omega_{\mu\nu}^\rho. \quad (3.62)$$

L'équation (3.50) d'une particule dans un champ de gravitation peut maintenant se réécrire sous une forme complètement invariante de jauge, en introduisant la dérivée covariante D_μ associée à la nouvelle connexion $\omega_{\mu\nu}^\rho$

$$u^\nu D_\nu u^\mu = 0, \quad (3.63)$$

qui est simplement l'équation d'une géodésique de l'espace-temps courbe.

3.3.3 Courbure de l'espace-temps

Comme l'espace-temps est courbe, les dérivés covariants ne commutent pas en général. Cependant, contrairement à la relativité générale la courbure s'exprime très simplement en fonction de la densité totale de masse ρ . Tout d'abord, le tenseur de courbure ou tenseur de Riemann est défini par l'équation

$$2D_{[\mu}D_{\nu]}u^\rho \equiv R_{\mu\nu}{}^\rho{}_\sigma u^\sigma, \quad (3.64)$$

soit en utilisant le fait que la connexion est symétrique $\omega_{\mu\nu}^\rho = \omega_{\nu\mu}^\rho$ (torsion nulle)

$$R_{\mu\nu}{}^\rho{}_\sigma = \partial_{[\mu}\omega_{\nu]\sigma}^\rho + \omega_{\lambda[\mu}^\rho\omega_{\nu]\sigma}^\lambda. \quad (3.65)$$

Cette dernière expression fait apparaître que le tenseur de courbure est défini par rapport à une connexion. Ce tenseur est nul s'il existe un système de coordonnées dans lequel la connexion est nulle. En présence d'un champ de gravitation, le tenseur de courbure n'est pas nul comme on peut le voir sur la formule

$$R_{\mu\nu}{}^\rho{}_\sigma = 2t_\sigma t_{[\mu}\nabla_{\nu]}g^\rho. \quad (3.66)$$

Dans les coordonnées aristotéliennes, les seules composantes non nulles sont $R_{0i}{}^j{}_0 = -R_{i0}{}^j{}_0$ et $R_{00}{}^j{}_0$. Ceci montre en particulier, qu'avec la connexion de Newton-Cartan (3.61), les sections de 3-espaces sont plates. La courbure ne se manifeste que dans l'espace-temps. La trace du tenseur de courbure définit le tenseur de Ricci

$$R_{\mu\nu} = R_{\rho\mu}{}^\rho{}_\nu = t_\mu t_\nu \gamma^{\rho\sigma} \nabla_\rho \nabla_\sigma \phi, \quad (3.67)$$

qui s'écrit plus simplement avec (3.54)

$$R_{\mu\nu} = t_\mu t_\nu (4\pi G\rho). \quad (3.68)$$

Le tenseur de Ricci ne dispose donc que d'une seule composante indépendante, $R_{00} = 4\pi G\rho$ dans les coordonnées aristotéliennes.

Contrairement au champ de gravitation g^μ , le tenseur courbure (3.65) est invariant sous des transformations de Milne. Ceci est clairement vérifié pour la trace du tenseur de courbure sur l'équation (3.68). Pour le tenseur de courbure lui-même, en appliquant la transformation de jauge (3.53) au champ gravitationnel sans oublier la transformation de la connexion (3.45), nous avons

$$\begin{aligned}\check{R}_{\mu\nu}{}^\rho{}_\sigma &= 2t_\sigma t_{[\mu} \check{\nabla}_{\nu]} \check{g}^\rho \\ &= 2t_\sigma t_{[\mu} (\nabla_{\nu]} \check{g}^\rho - t_{\nu]} a^\rho t_\sigma \check{g}^\sigma) \\ &= R_{\mu\nu}{}^\rho{}_\sigma - 2t_\sigma t_{[\mu} \nabla_{\nu]} a^\rho.\end{aligned}\tag{3.69}$$

De la deuxième à la troisième ligne, nous avons utilisé le fait que le champ gravitationnel est purement spatial quelle que soit la jauge donc $t_\nu g^\nu = t_\nu \check{g}^\nu = 0$. De plus par l'équation (3.46), nous pouvons écrire

$$\nabla_\nu a^\rho = t_\nu (e^\sigma \nabla_\sigma a^\rho).\tag{3.70}$$

Avec cette identité, il est maintenant évident que le tenseur de courbure est bien invariant de jauge $\check{R}_{\mu\nu}{}^\rho{}_\sigma = R_{\mu\nu}{}^\rho{}_\sigma$.

Nous voyons ainsi que les effets gravitationnels sont bien physiques puisqu'il n'existe aucune jauge dans laquelle nous pouvons annuler le tenseur de courbure. L'approche de Cartan permet d'introduire le champ de gravitation, indépendamment du choix d'une jauge particulière, simplement par la spécification de la connexion $\omega_{\mu\nu}^\rho$.

Chapitre 4

Hydrodynamique d'un mélange de fluides non relativistes

Sommaire

4.1	Principe variationnel	60
4.2	Invariance de jauge	78
4.3	Mélange de fluides parfaits	80
4.4	Tenseur énergie-impulsion	89
4.5	Symétries et vecteurs de Killing généralisés	96
4.6	Théorème du viriel	110

Dans le chapitre précédent, nous avons discuté de la structure géométrique de l'espace-temps newtonien. Nous allons maintenant montrer comment décrire l'évolution de la matière dans cet espace-temps, en généralisant l'équation d'Euler à un mélange de fluides parfaits couplés par des effets non dissipatifs d'entraînement. Plus spécifiquement, nous allons adapter au cadre newtonien la formulation variationnelle convective de l'hydrodynamique relativiste.

La formulation quadridimensionnelle offre un cadre théorique particulièrement bien adapté pour l'étude des lois de conservations, en exploitant notamment le calcul extérieur. Nous déduirons ainsi très simplement des lois de conservation, comme celle de l'hélicité, qui sont moins évidentes à obtenir dans la décomposition traditionnelle entre temps et espace.

Nous montrerons ensuite comment construire le tenseur énergie-impulsion dans un tel milieu et comment obtenir des invariants par l'analyse des symétries du système, notamment en adaptant dans l'espace-temps newtonien la notion de vecteurs de Killing en relativité générale. Nous appliquerons ces résultats pour généraliser les lois de conservations de Bernoulli et mettre en évidence de nouvelles formes du théorème du viriel.

4.1 Principe variationnel

Nous allons décrire la construction d'un principe variationnel covariant permettant de déduire les équations dynamiques d'un mélange de fluides sous forme covariante. Dans un premier temps, nous étudierons une particule ponctuelle puis nous verrons ensuite comment la généralisation s'opère pour un fluide.

4.1.1 Particules ponctuelles

En mécanique classique, la trajectoire suivie par une particule ponctuelle soumise à des champs de forces dérivant de potentiels est celle pour laquelle l'action \mathcal{A} , définie comme une intégrale sur le temps

$$\mathcal{A} = \int L dt, \quad (4.1)$$

est stationnaire. L'intégrand est la fonction de Lagrange définie comme la différence entre énergie cinétique et énergie potentielle. Pour une particule dans un champ de gravitation dont le potentiel est ϕ , cette fonction s'écrit simplement

$$L = \frac{1}{2}mv^2 - m\phi, \quad (4.2)$$

où m est la masse de la particule et v la norme de sa vitesse (spatiale).

Pour obtenir une formulation covariante des équations du mouvement, nous devons tout d'abord exprimer l'action elle-même sous forme covariante. Tout d'abord, la 3-vitesse induit une quadrivitesse v^μ dans l'espace-temps dont les composantes dans les coordonnées aristotéliennes sont simplement données par

$$v^0 = 0, \quad v^i = \frac{dX^i}{dt} \quad (4.3)$$

qui peut s'écrire sous forme covariante par

$$v^\mu = u^\mu - e^\mu \quad (4.4)$$

qui exprime explicitement que la vitesse est mesurée dans un référentiel donné, et est purement spatiale

$$v^\mu t_\mu = 0. \quad (4.5)$$

Autrement dit, v^μ est la partie spatiale de la 4-vitesse u^μ , d'ailleurs il est facile de vérifier que $v^\mu = \gamma^\mu_\nu u^\nu$.

Comme la vitesse v^μ est purement spatiale, nous pouvons monter et descendre les indices avec les métriques dégénérées : $v_\mu = \gamma_{\mu\nu} v^\nu$ et $v^\mu = \gamma^{\mu\nu} v_\nu$. Dans ces expressions nous pouvons introduire la 4-vitesse u^μ

$$v_\mu = \gamma_{\mu\nu} u^\nu \quad v^\mu = \gamma^{\mu\nu} u_\nu. \quad (4.6)$$

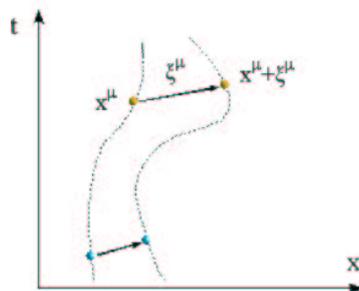


FIGURE 4.1 – Schéma illustrant le déplacement de la trajectoire d'une particule pour un espace-temps à deux dimensions (une d'espace et une de temps).

En remarquant que $\phi = \phi t_\mu u^\mu$ et que $v^2 = v_\mu v^\mu = v_\mu u^\mu$, la fonction de Lagrange L peut finalement s'écrire sous forme covariante

$$L = \pi_\mu u^\mu, \quad (4.7)$$

avec la 4-impulsion π_μ définie par

$$\pi_\mu = mv_\mu - \mathcal{E}t_\mu \quad (4.8)$$

où \mathcal{E} est l'énergie de la particule

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}mv^2 + m\phi. \quad (4.9)$$

La 4-impulsion peut se décomposer en une partie purement cinétique, p_μ définie par

$$p_\mu = mv_\mu - \frac{1}{2}mv^2 t_\mu, \quad (4.10)$$

d'où

$$\pi_\mu = p_\mu - m\phi t_\mu. \quad (4.11)$$

L'impulsion p_μ n'a que trois composantes indépendantes puisqu'elle vérifie l'égalité

$$\gamma^{\mu\nu} p_\mu p_\nu = m^2 v^2 = -2m\phi p_\mu. \quad (4.12)$$

L'action s'exprime finalement comme une intégrale le long de la trajectoire de la particule $dx^\mu = u^\mu dt$, de la 4-impulsion

$$\mathcal{A} = \int \pi_\mu dx^\mu. \quad (4.13)$$

Cette dernière expression est clairement covariante, ce qui garantit que l'action est indépendante du choix des coordonnées de l'espace-temps.

Soient x^μ les coordonnées de la trajectoire de la particule. Déplaçons cette trajectoire d'une quantité infinitésimale $x^\mu \mapsto x^\mu + \xi^\mu$ comme le montre la figure 4.1 (le déplacement

ξ^μ dépend du temps universel t). Cette opération n'est pas un changement de coordonnées. Dans ce déplacement, les objets géométriques propres à la structure newtonienne de l'espace-temps, comme le gradient du temps universel ou la métrique sont évidemment inchangés. La variation de la vitesse de la particule est donc donnée par

$$\delta v^\mu = \frac{d\xi^\mu}{dt} = u^\nu \nabla_\nu \xi^\mu. \quad (4.14)$$

Le déplacement ξ^μ n'est pas complètement arbitraire puisque nous supposons que seule la particule est déplacée. En particulier, les variations que nous considérons sont telles que $\delta t_\mu = 0$ ce qui implique, d'après l'identité $u^\mu t_\mu = 1$, que

$$t_\mu \delta u^\mu = 0. \quad (4.15)$$

Nous avons de plus que $\delta e^\mu = 0$ donc d'après (4.4) $\delta v^\mu = \delta u^\mu$. En injectant la relation (4.15) dans l'équation (4.14), nous obtenons une contrainte sur les déplacements des trajectoires

$$u^\nu \nabla_\nu \xi^\mu t_\mu = 0. \quad (4.16)$$

En conséquence le déplacement temporel ne peut être qu'un simple changement d'origine de l'horloge (en se rappelant que ξ^μ , donc $\xi^\mu t_\mu$, ne dépend *que* du temps t).

Par ailleurs, puisque les variations que nous considérons sont telles que $\delta e^\mu = 0$, nous avons d'après l'équation (4.12) que

$$\gamma^{\mu\nu} p_\nu \delta p_\mu = -m e^\mu \delta p_\mu \quad (4.17)$$

et en remplaçant l'expression (4.10) de l'impulsion, nous obtenons la relation

$$\gamma^{\mu\nu} v_\nu \delta p_\mu = -e^\mu \delta p_\mu. \quad (4.18)$$

Nous avons ainsi montré que la variation de l'impulsion est orthogonale à la vitesse

$$u^\mu \delta p_\mu = 0. \quad (4.19)$$

La variation de la fonction de Lagrange s'écrit $\delta L = \pi_\mu \delta u^\mu + u^\mu \delta \pi_\mu$. En utilisant l'identité (4.19), cette variation se simplifie en

$$\delta L = \pi_\mu \delta u^\mu - m \delta \phi = m v_\mu \delta u^\mu - m \delta \phi, \quad (4.20)$$

$\delta \phi$ est la variation du potentiel gravitationnel induite par le déplacement, c'est-à-dire

$$\delta \phi = \phi\{x^\mu + \xi^\mu\} - \phi\{x^\mu\} = \xi^\mu \nabla_\mu \phi. \quad (4.21)$$

En remarquant que $\nabla_\nu u^\nu = 0$, le premier terme dans l'équation (4.20) avec (4.14) peut se décomposer comme

$$m v_\mu u^\nu \nabla_\nu \xi^\mu = u^\nu \nabla_\nu (m v_\mu \xi^\mu) - \xi^\mu u^\nu \nabla_\nu m v_\mu. \quad (4.22)$$

La variation de l'action lors du déplacement de la trajectoire de la particule est

$$\delta\mathcal{A} = - \int (m\nabla_\mu\phi + u^\nu\nabla_\nu mv_\mu)\xi^\mu dt + \int dx^\nu\nabla_\nu(mv_\mu\xi^\mu). \quad (4.23)$$

En supposant que le déplacement de la trajectoire est nul aux deux extrémités (aux temps initial et final), le dernier terme disparaît. L'action est donc extrémale si $\delta\mathcal{A} = 0$ pour un déplacement arbitraire ξ^μ , ce qui conduit aux équations du mouvement

$$u^\nu\nabla_\nu mv_\mu = -m\nabla_\mu\phi, \quad (4.24)$$

ou dans les coordonnées aristotéliennes

$$\frac{dp_i}{dt} = -m\nabla_i\phi, \quad p_i = mv_i. \quad (4.25)$$

Afin de préparer la généralisation du principe variationnel à un fluide, remarquons que l'action peut s'écrire sous la forme

$$\mathcal{A} = \int d^4x \Lambda \quad (4.26)$$

avec l'élément de 4-volume défini à partir des déplacements infinitésimaux $dx_{(\nu)}^\mu$, $\nu = 0, 1, 2, 3$ (base coordonnée de l'espace cotangent) par

$$d^4x \equiv \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} dx_{(1)}^\mu dx_{(2)}^\nu dx_{(3)}^\rho dx_{(4)}^\sigma. \quad (4.27)$$

La covariance de l'action est assurée si la densité lagrangienne Λ (aussi appelée fonction maître) est un scalaire. Ceci est clairement vérifié dans le cas présent puisque Λ est donnée par

$$\Lambda = n^\mu\pi_\mu, \quad (4.28)$$

où nous avons introduit le quadrivecteur courant $n^\mu = nu^\mu$. Dans le cas d'une particule ponctuelle située en y^μ , la densité est simplement donnée par une distribution de Dirac

$$n\{x^\mu\} = \delta\{x^\mu - y^\mu\}. \quad (4.29)$$

4.1.2 Fluide parfait

Nous allons maintenant généraliser la discussion précédente au cas d'un fluide (pour un ouvrage d'introduction sur l'hydrodynamique, voir par exemple Guyon *et al.* (1991)). Un fluide est caractérisé par un ensemble de *champs* : champ de densité n , champ de vitesse v^μ , champ de pression P , etc. Nous allons construire un principe variationnel *convectif* en déplaçant la trajectoire de *chaque* « particule de fluide » sous la forme $x^\mu \mapsto x^\mu + \xi^\mu$. Cette idée a été proposée par Taub (1954) en relativité générale, puis développée par Carter (1989) (voir les références citées) et indépendamment par Kijowski *et al.* (1981). La formulation non relativiste a été récemment décrite par Prix (2000, 2004) dans le

cadre d'une décomposition 3+1 de l'espace-temps newtonien. L'hydrodynamique peut être déduite de façon équivalente (voir Carter & Khalatnikov (1992)) par un principe variationnel basé sur une représentation de type Clebsch dans laquelle le champ de vitesse est décomposé en plusieurs champs scalaires dont les variations sont arbitraires (voir Schutz (1970), Carter & Gaffet (1988)). Néanmoins ces champs n'ont pas d'interprétation physique en général. Les équations de l'écoulement peuvent également s'obtenir par une approche lagrangienne, en considérant des variations par rapport au champ $x_a^\mu\{t\}$ qui représente la trajectoire d'une particule de fluide a .

Variations convectives

Une particule de fluide, une notion introduite par Leonhard Euler, est un élément de fluide dont les dimensions sont petites devant les échelles caractéristiques de l'écoulement mais grandes devant le libre parcours moyen des molécules (une particule de fluide contient en général un grand nombre de molécules). Dans le déplacement, le nombre de molécules contenues dans chaque particule de fluide reste constant. Désormais ξ^μ est un *champ* de déplacement infinitésimal, qui n'est pas nécessairement purement spatial. Autrement dit, les particules de fluide sont déplacées dans l'espace *et* dans le temps. Le champ de déplacement modifie donc la configuration globale de l'écoulement ce qui induit une variation des champs physiques du fluide. Comme le fluide est caractérisé par le courant n^μ , l'effet du déplacement est un nouveau courant \tilde{n}^μ . Ainsi pour n'importe quel champ physique $q = q\{n^\mu\}$, le nouveau champ après le déplacement sera simplement $\tilde{q} \equiv q\{\tilde{n}^\mu\}$.

Il existe essentiellement deux types de points de vue : eulérien et lagrangien. La variation eulérienne d'un champ q , notée par δq est la différence *en un même point* de l'espace-temps de ce champ, avant et après le déplacement :

$$\delta q\{x^\mu\} \equiv \tilde{q}\{x^\mu\} - q\{x^\mu\}. \tag{4.30}$$

La variation lagrangienne, notée Δ d'un champ q est la différence *pour une même particule de fluide* de ce champ avant et après le déplacement. Pour un champ scalaire, cette variation est égale à $\Delta q\{x^\mu\} = \tilde{q}\{x^\mu\} - q\{x^\mu - \xi^\mu\}$. Si q est un champ vectoriel, et plus généralement tensoriel, cela n'a pas de sens de comparer le champ en des points différents parce que l'espace vectoriel (espace tangent) n'est défini qu'en un point donné de l'espace-temps. Il faut donc transporter le champ en un même point (transport de Lie le long de ξ^μ). Cependant, la définition pour un champ scalaire est parfois employée pour n'importe quel tenseur. Finalement la variation lagrangienne pour un champ quelconque est donnée par

$$\Delta q\{x^\mu\} = \delta q\{x^\mu\} + \vec{\xi}\mathcal{L}q\{x^\mu\}. \tag{4.31}$$

Pour rendre un peu plus intuitifs ces deux points de vue, considérons l'écoulement d'une rivière. Le point de vue eulérien consiste à observer l'écoulement depuis la berge. Le point de vue lagrangien consiste à observer la rivière depuis une barque qui est emportée par le flot. Supposons que nous soyons maintenant assis dans la barque. Nous nous déplaçons par transport de Lie dans le champ de vitesse de la rivière. Si nous disposions

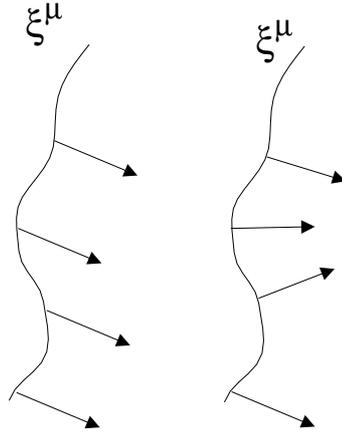


FIGURE 4.2 – Les schémas à gauche et à droite, illustrent respectivement le transport parallèle et le transport de Lie d'un vecteur (représenté par une flèche) le long d'un champ ξ^μ .

d'une boussole, la direction de l'aiguille aimantée serait transportée parallèlement dans le courant de la rivière. Ces deux types de transports sont illustrés sur la figure 4.2.

Etant donnée une mesure $\varepsilon_{\mu\nu\rho}$ du 3-volume et le champ de densité n , le nombre N de particules (ici dans le sens de molécules ou d'atomes) contenue dans un volume \mathcal{V} est donné par l'intégrale

$$N = \int_{\mathcal{V}} n d\mathcal{V}, \quad (4.32)$$

où le volume élémentaire $d\mathcal{V}$ est défini par

$$d\mathcal{V} = \varepsilon_{\mu\nu\rho} dx_1^\mu dx_2^\nu dx_3^\rho \quad (4.33)$$

où $dx_1^\mu, dx_2^\nu, dx_3^\rho$ sont les déplacements infinitésimaux. Pour que N soit le nombre de particules associé à une « particule » de fluide, la mesure de 3-volume doit être orthogonale au flot u^μ , soit $\varepsilon_{\mu\nu\rho} \equiv \varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} u^\sigma$.

Cette formulation nécessite de connaître la structure de l'espace-temps, via la mesure de volume. En fait il est plus judicieux pour la construction du principe variationnel d'exprimer le nombre de particules dans le 3-volume \mathcal{V} à l'aide d'une 3-forme $N_{\mu\nu\rho}$

$$N = \int_{\mathcal{V}} N_{\mu\nu\rho} dS^{\mu\nu\rho}, \quad (4.34)$$

où $dS^{\mu\nu\rho}$ est l'élément de la 3-surface

$$dS^{\mu\nu\rho} = 3! dx_1^{[\mu} dx_2^\nu dx_3^{\rho]}. \quad (4.35)$$

L'intégrale (4.34) s'interprète alors comme le *flux* de la 3-forme $N_{\mu\nu\rho}$ à travers la 3-surface. Cette formulation se ramène à la précédente, en posant

$$N_{\mu\nu\rho} = \varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} n^\sigma, \quad (4.36)$$

$\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$ étant la mesure de l'espace-temps, puisque l'élément de volume vaut

$$d\mathcal{V} = \varepsilon_{\mu\nu\rho} dS^{\mu\nu\rho}, \quad (4.37)$$

et que $n^\mu = nu^\mu$.

Le courant peut s'exprimer en fonction de la 3-forme (4.36) par la formule

$$n^\mu = \frac{1}{3!} \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} N_{\nu\rho\sigma}. \quad (4.38)$$

Ainsi la conservation du nombre de particules,

$$\nabla_\mu n^\mu = 0, \quad (4.39)$$

se traduit dans le langage de la 3-forme par l'annulation de sa dérivée extérieure

$$(\partial \wedge N)_{\mu\nu\rho\sigma} = 4\partial_{[\mu} N_{\nu\rho\sigma]} = 0, \quad (4.40)$$

puisque

$$\nabla_\mu n^\mu = \frac{1}{4!} \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} (\partial \wedge N)_{\mu\nu\rho\sigma}. \quad (4.41)$$

L'intérêt de la formulation à la Cartan est que dans un champ de déplacement ξ^μ , la variation lagrangienne de la 3-forme $N_{\mu\nu\rho}$ est tout simplement nulle puisque cette dernière est indépendante de la structure de l'espace-temps (une variation lagrangienne suppose en effet un déplacement par rapport à un certain référentiel). Par conséquent sa variation eulérienne sera donnée par

$$\delta N_{\mu\nu\rho} = -\vec{\xi} \mathcal{L} N_{\mu\nu\rho}. \quad (4.42)$$

La dérivée de Lie ne nécessite la connaissance d'aucune structure particulière de l'espace-temps (connexion, métrique). Elle peut se calculer par la formule de Cartan

$$\vec{\xi} \mathcal{L} N_{\mu\nu\rho} = 4\xi^\sigma \partial_{[\sigma} N_{\mu\nu\rho]} + 3\partial_{[\mu} \xi^\sigma N_{\sigma|\nu\rho]}. \quad (4.43)$$

Comme la dérivée de Lie est indépendante de la connexion (symétrique), les dérivées partielles peuvent être substituées par des dérivées covariantes. De cette façon, puisque $\nabla_\mu \varepsilon_{\nu\rho\sigma\delta} = 0$, la variation de la 3-forme devient

$$-\delta N_{\mu\nu\rho} = 4\xi^\sigma \varepsilon_{\delta[\mu\nu\rho} \nabla_{\sigma]} n^\delta + 3\varepsilon_{\delta\sigma[\nu\rho] \nabla_{\mu]} \xi^\sigma n^\delta. \quad (4.44)$$

Or la variation du courant qui résulte du champ de déplacement s'écrit

$$\delta n^\mu = \frac{1}{3!} \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \delta N_{\nu\rho\sigma}, \quad (4.45)$$

en utilisant le fait que $\delta\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} = 0$ puisque la structure de l'espace-temps n'est pas modifiée lors du déplacement. Finalement, nous avons

$$\delta n^\mu = n^\nu \nabla_\nu \xi^\mu - \xi^\nu \nabla_\nu n^\mu - n^\mu \nabla_\nu \xi^\nu. \quad (4.46)$$

Puisque seul le fluide est déplacé, l'espace-temps étant inchangé, les variations eulériennes des tenseurs de structure, et de la connexion sont nulles $\delta\Gamma_{\mu\nu}^{\rho} = 0$, par conséquent la variation eulérienne δ et la dérivée covariante ∇_{μ} commutent. Par contre, les variations lagrangiennes de ces mêmes tenseurs ne sont pas nulles en général. Nous avons ainsi la propriété remarquable que la divergence du courant déplacé s'annule si la divergence du courant est elle-même nulle puisque

$$\delta(\nabla_{\nu}n^{\nu}) = -\nabla_{\mu}(\xi^{\mu}\nabla_{\nu}n^{\nu}). \quad (4.47)$$

Ceci n'est pas très étonnant puisque nous avons justement considéré des variations qui préservent le nombre de particules.

L'expression (4.45) est identique à celle obtenue dans le cas relativiste, ce qui n'est pas surprenant puisque nous n'avons pas eu à supposer une métrique particulière. Nous avons seulement eu besoin d'une mesure de l'espace-temps et d'une dérivée covariante qui préserve cette mesure. En revanche les expressions pour la densité n et la quadrivitesse u^{μ} sont différentes de leurs homologues relativistes parce qu'elles s'obtiennent en introduisant explicitement le gradient du temps t_{μ} , propre à l'espace-temps newtonien, par $n^{\mu} = nu^{\mu}$ et $n = u^{\mu}t_{\mu}$. Comme t_{μ} n'est pas modifié lors du déplacement des particules de fluide puisqu'il fait parti de la structure de l'espace-temps, nous avons $\delta(t_{\mu}n^{\mu}) = t_{\mu}\delta n^{\mu}$. Il suffit donc de contracter l'expression (4.47) par t_{μ} pour obtenir la variation de la densité, en se rappelant que $\nabla_{\nu}t_{\mu} = 0$

$$\delta n = t_{\mu}n^{\nu}\nabla_{\nu}\xi^{\mu} - \nabla_{\nu}(n\xi^{\nu}). \quad (4.48)$$

La variation lagrangienne de la densité s'obtient par la formule générale $\Delta n = \delta n + \vec{\xi}\mathcal{L}n$, soit

$$\Delta n = t_{\mu}n^{\nu}\nabla_{\nu}\xi^{\mu} - n\nabla_{\nu}\xi^{\nu} \quad (4.49)$$

qui s'écrit dans la formulation 3+1 traditionnelle en supposant que le déplacement est purement spatial, sous une forme bien connue (voir par exemple Friedman & Schutz (1978)) $\Delta n = -n\nabla_i\xi^i$. En écrivant que $\delta n^{\mu} = u^{\mu}\delta n + n\delta u^{\mu}$, nous en déduisons l'expression de la variation de la quadrivitesse

$$\delta u^{\mu} = u^{\nu}\nabla_{\nu}\xi^{\mu} - \xi^{\nu}\nabla_{\nu}u^{\mu} - u^{\mu}u^{\nu}t_{\rho}\nabla_{\nu}\xi^{\rho}. \quad (4.50)$$

La variation lagrangienne correspondante est donc égale à

$$\Delta u^{\mu} = \delta u^{\mu} + \vec{\xi}\mathcal{L}u^{\mu} = -u^{\mu}u^{\nu}t_{\rho}\nabla_{\nu}\xi^{\rho} \quad (4.51)$$

En particulier, puisque la variation eulérienne du vecteur d'éther e^{μ} est nulle, $\Delta v^{\mu} = \Delta(u^{\mu} - e^{\mu}) = \Delta u^{\mu} + \vec{\xi}\mathcal{L}e^{\mu}$ d'où

$$\Delta v^{\mu} = -u^{\mu}u^{\nu}t_{\rho}\nabla_{\nu}\xi^{\rho} + e^{\nu}\nabla_{\nu}\xi^{\mu}. \quad (4.52)$$

Dans les coordonnées aristotéliennes avec l'hypothèse $\xi^0 = 0$, nous retrouvons l'expression familière de Friedman & Schutz (1978) : $\Delta v^i = \partial_t\xi^i$.

Densité lagrangienne

Nous avons vu dans le cas d'une seule particule, qu'il est possible de formuler un principe variationnel à partir d'une densité lagrangienne Λ . La généralisation à un fluide est immédiate puisque nous avons défini les variations du courant (4.46). La densité lagrangienne d'un fluide parfait peut se décomposer en un terme cinétique Λ_{cin} , un terme potentiel Λ_{pot} et un terme $\Lambda_{\text{int}} = -U_{\text{int}}$ associé à l'énergie interne U_{int} du fluide. Nous supposons de plus que le fluide est *barotrope*, c'est-à-dire que l'énergie interne $U_{\text{int}}\{n\}$ ne dépend que de la densité n . Nous avons déjà calculé les deux premiers termes dans la section précédente :

$$\Lambda_{\text{cin}} = n^\mu p_\mu \tag{4.53}$$

$$\Lambda_{\text{pot}} = -\rho\phi = -\phi\rho^\mu t_\mu, \tag{4.54}$$

en introduisant le courant de masse $\rho^\mu = \rho u^\mu = mn^\mu$ avec $\rho = nm$.

En introduisant le potentiel chimique χ , qui est indépendant du choix de jauge, par

$$\chi \equiv \frac{dU_{\text{int}}}{dn}, \tag{4.55}$$

la variation de la densité lagrangienne Λ_{int} est alors simplement donnée par

$$\delta\Lambda_{\text{int}} = -\chi\delta n. \tag{4.56}$$

La relation (4.19), à savoir

$$u^\mu \delta p_\mu = 0, \tag{4.57}$$

que nous avons démontrée dans le cas d'une seule particule, reste valide pour un fluide. Par conséquent la variation de la contribution cinétique à la densité lagrangienne est égale à

$$\delta\Lambda_{\text{cin}} = p_\mu \delta n^\mu. \tag{4.58}$$

En rassemblant tous les termes, la variation à la densité Lagrangienne peut se mettre sous la forme

$$\delta\Lambda = \pi_\mu \delta n^\mu - \rho\delta\phi \tag{4.59}$$

en introduisant le quadrivecteur impulsion π_μ par

$$\pi_\mu = \mu_\mu - m\phi t_\mu, \tag{4.60}$$

où μ_μ est défini par la variation du lagrangien matériel $\Lambda_{\text{mat}} = \Lambda_{\text{cin}} + \Lambda_{\text{int}}$

$$\delta\Lambda_{\text{mat}} = \mu_\mu \delta n^\mu, \tag{4.61}$$

soit plus explicitement

$$\mu_\mu = p_\mu - \chi t_\mu. \tag{4.62}$$

La seule différence entre le cas fluide et des particule ponctuelles provient de la présence du potentiel chimique χ . La densité lagrangienne Λ peut finalement s'exprimer avec le covecteur impulsion (4.60) comme

$$\Lambda = n^\mu \pi_\mu + P \quad (4.63)$$

où P désigne la pression du fluide définie par ¹

$$P \equiv n^2 \frac{\partial(U_{\text{int}}/n)}{\partial n} = n\chi - U_{\text{int}}. \quad (4.64)$$

Lorsque la pression est nulle (modèle de poussières), on retrouve l'expression (4.28) d'un ensemble de particules ponctuelles en identifiant la densité par un peigne de Dirac (somme de distribution de Dirac). Le modèle de poussières permet par exemple de décrire des galaxies ou des amas dans les simulations d'évolution stellaire.

En développant la variation du courant, la variation de la densité lagrangienne peut finalement s'écrire comme

$$\delta\Lambda = \nabla_\mu (2\pi_\nu n^{[\mu} \xi^{\nu]}) - f_\mu \xi^\mu - \rho \delta\phi, \quad (4.65)$$

où le covecteur f_μ s'interprète comme la 4-densité de force s'exerçant sur le fluide (sans compter la force gravitationnelle)

$$f_\mu = 2n^\nu \nabla_{[\nu} \pi_{\mu]} + \pi_\mu \nabla_\nu n^\nu. \quad (4.66)$$

La stationnarité de l'action définie par $\mathcal{A} = \int d^4x \Lambda$ pour un champ de déplacement *arbitraire* conduit à $f_\mu = 0$, le premier terme ne donnant aucune contribution à l'action en supposant que le champ de déplacement s'annule sur le bord du domaine d'intégration.

En supposant que le courant est conservé, $\nabla_\mu n^\mu = 0$, les équations régissant la dynamique de l'écoulement d'un fluide parfait s'écrivent finalement

$$n^\nu \varpi_{\mu\nu} = 0, \quad (4.67)$$

où $\varpi_{\mu\nu} = 2\nabla_{[\mu} \pi_{\nu]}$ est une 2-forme qui peut s'interpréter comme une vorticité généralisée. Cette vorticité est l'analogie pour un fluide du tenseur de Maxwell $F_{\mu\nu}$ en électromagnétisme, qui est défini comme la dérivée extérieure d'un potentiel A_μ . L'impulsion généralisée est donc analogue au potentiel électromagnétique A_μ .

L'équation (4.67) est simplement la formulation covariante de l'équation d'Euler, qui peut se réécrire sous une forme plus familière

$$u^\nu \nabla_\nu u^\mu = -\gamma^{\mu\nu} \left(\nabla_\nu \phi + \frac{1}{\rho} \nabla_\nu P \right) \quad (4.68)$$

soit en décomposition 3+1, dans les coordonnées aristotéliennes,

$$\partial_t v_i + v^j \nabla_j v_i = -\nabla_i \phi - \frac{1}{\rho} \nabla_i P. \quad (4.69)$$

L'intérêt d'une formulation covariante, est de permettre entre autre de déduire des lois de conservation de façon beaucoup plus naturelle et élégante que dans la formulation traditionnelle.

¹En écrivant la première loi de la thermodynamique pour une particule, $d(U_{\text{int}}/n) = Tds - Pd(1/n)$ où s est l'entropie par particule, il vient $P \equiv -\partial(U_{\text{int}}/n)/\partial(1/n)$.

Théorème de Kelvin-Helmholtz

La vorticit  cinématique habituellement d finie en m canique des fluides comme le rotationnel du champ de vitesse, soit sous forme covariante

$$\omega^\mu = \frac{1}{2}\varepsilon^{\mu\nu\rho}\nabla_\nu v_\rho, \tag{4.70}$$

est reli e   la 2-forme de vorticit  par la formule

$$2m\omega^\mu = \frac{1}{2}\varepsilon^{\mu\nu\rho}\varpi_{\nu\rho}. \tag{4.71}$$

Cette vorticit  cinématique est bien purement spatiale, puisque $t_\mu\omega^\mu = 0$.

Le th or me de Kelvin  nonce la conservation de la circulation pour un fluide parfait¹. Nous allons le reformuler sous forme covariante. Tout d'abord la circulation \mathcal{C} est d finie par l'int grale du champ d'impulsion le long de n'importe quel contour fluide ferm 

$$\mathcal{C} = \oint d\vec{l}]_{\underline{\pi}} = \oint dx^\mu \pi_\mu, \tag{4.72}$$

soit encore, par le th or me de Stokes

$$\mathcal{C} = \int d\vec{S}]_{\partial\underline{\pi}} = \int d\vec{S}]_{\underline{\varpi}} = \frac{1}{2} \int dS^{\mu\nu} \varpi_{\mu\nu}, \tag{4.73}$$

o  $dS^{\mu\nu}$ est l' l ment de surface d finie par le contour fluide. En d composition 3 + 1, la circulation s' crit sous une forme plus famili re $\mathcal{C} = \oint dx^i m v_i \equiv m\Gamma$, o  Γ est la circulation de la vitesse.

Au cours du temps, le contour se d forme au gr s de l' coulement du fluide et la variation de la circulation est donc  gale, par d finition de la d riv e de Lie,  

$$\frac{d\mathcal{C}}{dt} = \frac{d}{dt} \int d\vec{S}]_{\underline{\varpi}} = \int d\vec{S}]_{\vec{u}\mathcal{L}\underline{\varpi}}. \tag{4.74}$$

La d riv e de Lie de la 2-forme est donn e par la formule de Cartan

$$\vec{u}\mathcal{L}\varpi_{\mu\nu} = 3u^\sigma\nabla_{[\sigma}\varpi_{\mu\nu]} - 2\nabla_{[\mu}(\varpi_{\nu]\sigma}u^\sigma). \tag{4.75}$$

Le premier terme est nul par la propri t  de fermeture de Poincar , le second l'est aussi par l' quation d'Euler ce qui d montre le th or me de Kelvin. La conservation de la circulation est donc  quivalente   la conservation de la vorticit  g n ralis e par transport de Lie le long des lignes de courant

$$\vec{u}\mathcal{L}\varpi_{\mu\nu} = 0. \tag{4.76}$$

Les lignes de tourbillons sont ainsi gel es dans le fluide.

¹Ce th or me traduit la conservation du moment cin tique du fluide.

En fait il est facile de se convaincre, que la vorticit  est conserv e le long de n'importe quelle ligne de courant homoth tique

$$\zeta \vec{u} \cdot \mathcal{L} \varpi_{\mu\nu} = 0, \quad (4.77)$$

o  ζ est n'importe quel *champ* scalaire. Cette derni re propri t  r sulte de l'invariance d' chelle de l' quation d'Euler $x^\mu \mapsto \alpha x^\mu$, du fait que seules n'interviennent des d riv es du premier ordre (l' quation de Navier-Stokes ne poss de pas cette invariance parce que les termes de viscosit s font intervenir des d riv es du deuxi me ordre).

H licit  et topologie

La formulation covariante permet de d duire tr s simplement des lois de conservation, notamment la conservation de l'h licit  introduite par Moreau (1961) en m canique des fluides, suite aux travaux de Woltjer (1958) sur l'h licit  magn tique, et a  t  reprise par Moffat (1969), Moffat & A. (1992) et par Peradzynski (1990) pour l'h lium superfluide. Le concept d'h licit  est donc relativement r cent en regard du th or me de Kelvin  nonc  en 1869 (un peu plus d'un si cle apr s la formulation de l' quation de Bernouilli). La notion d'h licit  emprunte   la th orie des noeuds dont l'un des fondateurs a  t  lord Kelvin, qui proposait que les atomes  taient des noeuds de tourbillon de l'hypoth tique  ther. En classant ainsi les diff rents types de noeuds, il pensait pouvoir expliquer les diff rentes longueurs d'ondes d' mission et d'absorption des atomes. Plus pr cis ment, l'h licit  est une g n ralisation de l'int grale de Gauss.

L'h licit  *scalaire* d'un fluide est d finie par l'int grale du produit scalaire du champ de vitesse par la vorticit  cin matique

$$\mathcal{H} = \int m v^i \omega_i d\mathcal{V}, \quad (4.78)$$

o  l'int grale porte sur un volume mat riel (c'est- -dire un volume dont la surface est form e de particules de fluides; le volume se d forme et se d place donc avec le fluide) dont la surface est telle que $\omega_i dS^i = 0$ (cette condition si elle satisfaite   un instant donn , le reste   un instant ult rieur en vertu du th or me de Kelvin). L'h licit  est reli e   la topologie des tubes de tourbillons, et plus pr cis ment aux nombres d'entrelacements des tubes. Ce type de structure s'observe par exemple dans les anneaux de fum es de cigarettes ou au dessus de volcans comme sur la figure 4.3.

Prenons le cas simple de deux tubes de tourbillons (la vorticit  est non nulle seulement   l'int rieur de ces tubes) comme sur la figure 4.4, et calculons l'h licit  pour un volume qui contient les deux tubes (les conditions aux limites sont automatiquement satisfaites puisque la vorticit  est nulle en dehors des tubes). L'int grale sur le premier tube est  gale  

$$\mathcal{H}_1 = \int_{\mathcal{V}_1} m v_i \omega^i d\mathcal{V} = \oint_{\mathcal{C}_1} m v_i \mathcal{C}_1 dx^i = \mathcal{C}_1 \oint_{\mathcal{C}_1} v_i dx^i, \quad (4.79)$$



FIGURE 4.3 – Tubes de tourbillons photographiés au dessus de l'Etna en juillet 2000 (avec l'aimable autorisation du volcanologue Tom Pfeiffer <http://www.decadevolcano.net>). Selon l'auteur, l'anneau aurait un diamètre compris entre 100 et 200 mètres.

où nous avons utilisé le théorème de Kelvin pour sortir la circulation \mathcal{C}_1 de l'intégrale. Par le théorème de Stokes, la dernière intégrale est simplement le flux de vorticit e \mathcal{C}_2 . Par un raisonnement analogue pour le second tube, l'h elicit e totale est finalement  egale  a

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 = 2\mathcal{C}_1\mathcal{C}_2. \quad (4.80)$$

Si les deux tubes sont d econect es, l'h elicit e est simplement nulle. Plus g en eralement lorsque N tubes (ferm es) de tourbillons sont entrelac es, l'h elicit e s' ecrit

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j=1}^N L_{ij}\mathcal{C}_i\mathcal{C}_j, \quad (4.81)$$

o u L_{ij} sont les nombres de liens (L_{ii} repr esente le nombre de noeuds d'un m eme tube). Le nombre de liens entre le tube i et le tube j est d efini par une somme sur tous les croisements c

$$L_{ij} = L_{ji} \equiv \sum_c \epsilon\{c\}, \quad (4.82)$$

o u $\epsilon\{c\} = \pm 1$ selon la position de chacun des tubes (voir figure 4.5). Puisque la circulation est conserv ee, il est  evident que l'h elicit e le sera  egalement dans ces exemples.

La conservation de l'h elicit e signifie donc que quelle que soit la d eformation des tubes de tourbillons par l' ecoulement du fluide, les tubes restent connect es. \mathcal{H} est donc un invariant topologique des lignes de tourbillons. Lorsque le fluide n'est pas parfait, l'h elicit e n'est plus n ecessairement conserv ee, en particulier des tubes de tourbillons peuvent se d econnecter et se reconnecter. Ces concepts topologiques sont utilis es en physique des plasmas et en astrophysique, notamment dans l' etude du champ magn etique solaire. L' energie magn etique d'un plasma est d'autant plus grande que les lignes de champ magn etique sont enchev etr ees les unes dans les autres. Par cons equent, la connaissance de la topologie du champ magn etique en plusieurs endroits fournit des indications sur les  echanges d' energie (voir Berger (2001)).

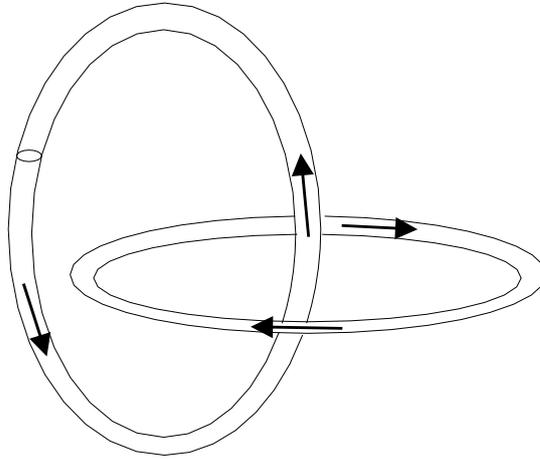


FIGURE 4.4 – Tubes de vorticités entrelacés. Les flèches indiquent la direction et le sens du 3-vecteur de vorticit  ω^i .

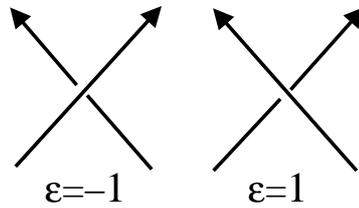


FIGURE 4.5 – Convention choisie pour la signature ϵ d'un croisement apparaissant dans la formule (4.82).

Nous allons maintenant démontrer la conservation d'un courant d'hélicité dans le cas général avec la formulation covariante. Le produit scalaire entre vitesse et vorticit   s'exprime sous forme covariante simplement comme $v^\mu \omega_\mu$ (comme ces deux tenseurs sont purement spatiaux, nous pouvons monter ou descendre les indices avec les m  triques $\gamma_{\mu\nu}$ et $\gamma^{\mu\nu}$). En rempla  ant la vorticit   par son expression (4.70), il est facile de voir que cette quantit   est proportionnelle    la composante temporelle d'un certain tenseur

$$2mv^\mu \omega_\mu = mv_\mu \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} t_\sigma \varpi_{\nu\rho} = \pi_\mu \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \varpi_{\nu\rho} t_\sigma. \tag{4.83}$$

Il semble donc naturelle de d  finir un *courant* d'h  licit   comme le dual de la vorticit   g  n  ralis  e et de l'impulsion par

$$\eta^\mu \equiv \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \varpi_{\rho\sigma} \pi_\nu. \tag{4.84}$$

La divergence du courant d'h  licit   est donn  e par

$$\nabla_\mu \eta^\mu = \frac{1}{4} \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \varpi_{\mu\nu} \varpi_{\rho\sigma}. \tag{4.85}$$

L'  quation d'Euler dans sa forme covariante (4.67), implique que la 2-forme de vorticit   est d  g  n  r  e avec le quadrivecteur courant comme vecteur propre associ      la valeur propre nulle. Or une matrice antisym  trique ne peut avoir de rang impair. En effet, le d  terminant d'une matrice antisym  trique A de dimension d , v  rifie $\det\{A\} = \det\{-A\} = (-1)^d \det\{A\}$ ce qui implique que $\det\{A\} = 0$ si d est impair. Par cons  quent, la vorticit   g  n  ralis  e $\varpi_{\mu\nu}$ est n  cessairement de rang 2 ce qui implique directement la conservation du courant d'h  licit   ¹

$$\nabla_\mu \eta^\mu = 0. \tag{4.86}$$

Dans le formalisme traditionnel, en d  composant temps et espace, cette d  monstration est clairement moins   vidente comme nous allons le montrer. Les composantes du courant d'h  licit   dans des coordonn  es aristot  liciennes sont donn  es par

$$\eta^0 = -\varepsilon^{ijk} \pi_i \nabla_j \pi_k, \tag{4.87}$$

$$\eta^i = \pi_0 \varepsilon^{ijk} \nabla_j \pi_k - \varepsilon^{ijk} \pi_j \nabla_0 \pi_k + \varepsilon^{ijk} \pi_j \nabla_k \pi_0. \tag{4.88}$$

Pour cette d  monstration, les indices latins pour les vecteurs seront remplac  s par une fl  che et la d  riv  e temporelle sera not  e $\nabla_0 = \partial_t$. Le produit vectoriel $(\phi \times \varphi)^i$ entre deux formes ϕ_i and φ_i est d  fini par le vecteur contravariant $\varepsilon^{ijk} \phi_j \varphi_k$. Le rotationnel et la 3-divergence pour un vecteur \vec{V} sont d  finis respectivement par

$$(\text{rot } \vec{V})^i \equiv \varepsilon^{ijk} \nabla_j V_k \tag{4.89}$$

¹Le tenseur compl  tement antisym  trique $\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$ est non nul seulement si tous les indices sont diff  rents or la vorticit   ne poss  de que deux composantes non nulles, disons $\varpi_{\mu\nu}$ et $\varpi_{\nu\mu}$ avec $\mu \neq \nu$ donc $\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \varpi_{\mu\nu} \varpi_{\rho\sigma} = 0$.

$$\operatorname{div} \vec{V} \equiv \nabla_i V^i. \quad (4.90)$$

Avec ces notations, le courant d'hélicité se décompose comme

$$\eta^0 = -\vec{\pi} \cdot \operatorname{rot} \vec{\pi}, \quad (4.91)$$

$$\vec{\eta} = \pi_0 \operatorname{rot} \vec{\pi} - \vec{\pi} \times \partial_t \vec{\pi} + \vec{\pi} \times \vec{\nabla} \pi_0. \quad (4.92)$$

Dans le cas du fluide parfait, les composantes de la 4-impulsion généralisée sont, avec les nouvelles notations, $\pi_0 = -\mathcal{E}$ et $\vec{\pi} = m\vec{v}$ avec $\mathcal{E} \equiv \frac{1}{2}mv^2 + m\phi + \chi$ est l'énergie totale par particule. Le courant d'hélicité se réduit alors à

$$\eta^0 = -2m^2 \vec{\omega} \cdot \vec{v}, \quad (4.93)$$

$$\vec{\eta} = -2m\mathcal{E}\vec{\omega} \quad (4.94)$$

avec la vitesse angulaire

$$\vec{\omega} = \frac{1}{2} \operatorname{rot} \vec{v} \quad (4.95)$$

qui est de divergence nulle $\operatorname{div} \vec{\omega} = 0$.

L'écoulement du fluide parfait est régi par l'équation d'Euler (voir par exemple Landau & Lifshitz (1989))

$$m\partial_t \vec{v} + \vec{\nabla} \mathcal{E} + 2m\vec{\omega} \times \vec{v} = \vec{0}. \quad (4.96)$$

En contractant cette dernière avec $m\vec{\omega}$, nous avons une première identité

$$m^2 \vec{\omega} \cdot \partial_t \vec{v} + m\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla} \mathcal{E} = 0. \quad (4.97)$$

D'autre part, en prenant le rotationnel de l'équation d'Euler, suivi du produit scalaire avec la 3-vitesse donne

$$m^2 \vec{v} \cdot \partial_t \vec{\omega} + m^2 \vec{v} \cdot \operatorname{curl}(\vec{\omega} \times \vec{v}) = 0. \quad (4.98)$$

En additionnant ces deux égalités, nous obtenons après quelques simplifications

$$2m^2 \partial_t (\vec{\omega} \cdot \vec{v}) + 2\operatorname{div}(m\vec{\omega}\mathcal{E}) + 2m^2 (\vec{v} \cdot \vec{\omega}) \operatorname{div} \vec{v} + 2m^2 \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{\omega}) - 2m^2 \vec{v} \cdot (\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}) = 0. \quad (4.99)$$

En calculant successivement le produit vectoriel de l'équation d'Euler avec la 3-vitesse, puis la divergence et en utilisant l'identité pour deux vecteurs \vec{V} et \vec{W} quelconques

$$\vec{\nabla}(\vec{W} \cdot \vec{V}) = \vec{W} \times \operatorname{rot} \vec{V} + \vec{V} \times \operatorname{rot} \vec{W} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} \vec{W} + \vec{W} \cdot \vec{\nabla} \vec{V}, \quad (4.100)$$

nous obtenons finalement

$$\begin{aligned} & \operatorname{div}(m^2 \vec{v} \times \partial_t \vec{v} + m\vec{v} \times \vec{\nabla} \mathcal{E}) + 8m^2 \vec{\omega} \cdot (\vec{v} \times \vec{\omega}) + 4m^2 \vec{\omega} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}) \\ & - 2m^2 (\vec{v} \cdot \vec{\omega}) \operatorname{div} \vec{v} - 2m^2 \vec{v} \cdot (\vec{v} \times \operatorname{rot} \vec{\omega}) - 2m^2 \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{\omega}) - 2m^2 \vec{v} \cdot (\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}) = 0. \end{aligned} \quad (4.101)$$

En combinant cette égalité avec l'équation (4.99), nous retrouvons la loi de conservation de l'hélicité sous la forme

$$2m^2 \partial_t (\vec{\omega} \cdot \vec{v}) = \operatorname{div} \left(-2m\vec{\omega}\mathcal{E} \right). \quad (4.102)$$

Nous allons démontrer explicitement dans notre formalisme que l'hélicité scalaire

$$\mathcal{H} \equiv \int_{\Sigma} dV \eta^{\mu} t_{\mu} \tag{4.103}$$

est conservée lorsque l'intégrale est prise dans un volume matériel. Par définition de la dérivée de Lie,

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\Sigma} d\vec{\Sigma}] \underline{h} = \int_{\Sigma} d\vec{\Sigma}] \vec{\xi} \mathcal{L} \underline{h} \tag{4.104}$$

où nous avons introduit la 3-forme d'hélicité $h_{\nu\rho\sigma}$ par

$$h_{\nu\rho\sigma} \equiv 3! \pi_{[\nu} \nabla_{\rho} \pi_{\sigma]}, \tag{4.105}$$

soit encore sous une forme équivalente

$$h_{\nu\rho\sigma} = \pi_{\nu} \varpi_{\rho\sigma} + \pi_{\sigma} \varpi_{\nu\rho} + \pi_{\rho} \varpi_{\sigma\nu}. \tag{4.106}$$

D'après la formule générale de Cartan, la dérivée de Lie de cette 3-forme est égale à

$$\vec{u} \mathcal{L} \underline{h} = \vec{u} \cdot \partial \underline{h} + \partial(\vec{u} \cdot \underline{h}). \tag{4.107}$$

Par ailleurs, la conservation du courant d'hélicité peut être reformulée en terme de cette 3-forme $h_{\nu\rho\sigma}$ comme

$$\nabla_{\mu} \eta^{\mu} = \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \nabla_{\mu} h_{\nu\rho\sigma} = 0, \tag{4.108}$$

autrement dit la dérivée extérieure de la 3-forme $h_{\nu\rho\sigma}$ est nulle donc le premier terme dans la formule de Cartan est nul. Finalement en appliquant le théorème de Stokes et l'équation d'Euler, nous avons

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \int_{\partial\Sigma} d\vec{S}] \vec{u} \cdot \underline{h} = \int_{\partial\Sigma} d\vec{S}] \varpi(\vec{u} \cdot \underline{\pi}) = 0. \tag{4.109}$$

Le fait que la 2-forme de vorticit  est d g n r e signifie qu'il existe un second vecteur propre de valeur propre nulle. Par la discussion pr c dente, il est facile de se convaincre que ce vecteur propre est proportionel   ω^{μ} . Ceci conduit   une version g n ralis e du th or me de Kelvin

$$(\zeta_1 \vec{u} + \zeta_2 \vec{\omega}) \mathcal{L} \varpi_{\mu\nu} = 0, \tag{4.110}$$

o  ζ_1 et ζ_2 sont deux champs scalaires arbitraires. La 2-forme de vorticit  est donc conserv e par transport de Lie le long de n'importe quelle courbe sur la surface balay e par le champ de vitesse et le champ de vorticit  cin matique. Cette 2-surface est intuitivement plus simple   concevoir dans la limite d'un superfluide, pour lequel la vorticit  est concentr e dans un nombre quantifi  de tubes de tourbillon (voir figure 4.6).

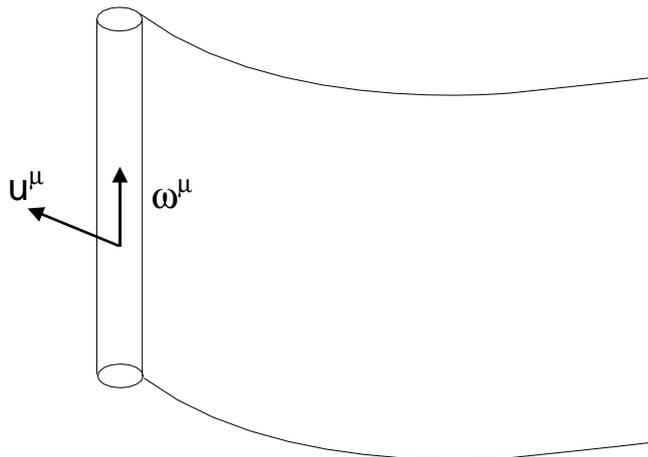


FIGURE 4.6 – Schéma illustrant la 2-surface balayée par un tourbillon.

Superfluidité

Si au lieu de nous retreindre à des variations convectives, c'est-à-dire des déplacements des trajectoires des particules de fluide, nous considérons des variations *arbitraires* en imposant simplement la conservation du courant, nous devons minimiser l'action avec pour densité lagrangienne $\Lambda - \varphi \nabla_\mu n^\mu$ où φ est un multiplicateur de Lagrange, dont la variation est

$$\delta\Lambda - \delta(\varphi \nabla_\mu n^\mu) = \pi_\mu \delta n^\mu - \rho \delta\phi - \varphi \nabla_\mu \delta n^\mu - \delta\varphi \nabla_\mu n^\mu. \quad (4.111)$$

La variation δn^μ du courant étant arbitraire, la minimisation de l'action implique que $\pi_\nu = -\nabla_\nu \varphi$ et par suite l'écoulement est irrotationnel $\varpi_{\mu\nu} = 0$. Une telle situation permet de décrire un superfluide¹. Le champ scalaire φ s'interprète alors comme la phase de la fonction d'onde du condensat de Bose associé. Nous voyons également que cette approche est insuffisante pour décrire un fluide parfait dont l'écoulement n'est pas irrotationnel. Il est nécessaire pour cela d'introduire une contrainte supplémentaire, la conservation de l'identité des particules (voir Lin (1963)). D'ailleurs, une variation libre des courants,

$$\delta\mathcal{A} = \int d^4x \pi_\mu \delta n^\mu \quad (4.112)$$

conduit simplement à $\pi_\mu = 0$!

Analogies entre mécanique des fluides et électromagnétisme

La vorticit  que nous avons introduite pr cedemment joue un r le analogue au tenseur covariant antisym trique (2-forme) de Maxwell $F_{\mu\nu}$ d fini comme la d riv e ext rieure d'un

¹Les particules (bosons) d'un superfluide sont toutes dans un m me  tat quantique et sont donc indiscernables. Par cons quent le fluide est invariant dans une rotation locale des particules. Autrement dit il est irrotationnel.

covecteur potentiel électromagnétique A_μ

$$F_{\mu\nu} \equiv 2\nabla_{[\mu}A_{\nu]}. \tag{4.113}$$

Le champ magnétique B^μ défini comme le dual

$$B^\mu \equiv \frac{1}{2}\varepsilon^{\mu\nu\rho}F_{\nu\rho}, \tag{4.114}$$

s'interprète comme un vecteur de vorticit . Les deux vecteurs B^μ et ω^μ sont d'ailleurs de type purement spatial et de divergence nulle

$$\nabla_\mu\omega^\mu = 0, \quad \nabla_\mu B^\mu = 0 \tag{4.115}$$

ce qui implique en particulier que les lignes de tourbillons, comme les lignes du champ magn tique, sont ferm es. L' quivalent du th or me de Kelvin-Helmholtz est le th or me de Alfv n pour un plasma dans la limite magn tohydrodynamique (MHD), de champ de vitesse u^μ , caract ris  par la condition que le champ  lectrique dans le r f rentiel du fluide est nul (conducteur parfait)

$$u^\mu F_{\mu\nu} = 0. \tag{4.116}$$

Cette derni re  quation a la forme d'une  quation de type Euler analogue   (4.67). Par le m me raisonnement qui a conduit au th or me de Kelvin-Helmholtz, Le tenseur de Maxwell est transport  par le fluide (le champ magn tique est gel ) :

$$\vec{u}\mathcal{L}F_{\mu\nu} = 0, \tag{4.117}$$

avec la g n ralisation imm diate, pour n'importe quel champ scalaire ζ_1 et ζ_2 ,

$$(\zeta_1\vec{u} + \zeta_2\vec{B})\mathcal{L}F_{\mu\nu} = 0. \tag{4.118}$$

En poursuivant l'analogie, le courant d'h licit  magn tique d fini par

$$\eta_{\text{m}}^\mu \equiv \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}F_{\rho\sigma}A_\nu \tag{4.119}$$

est conserv  dans l'hypoth se MHD, $\nabla_\mu\eta_{\text{m}}^\mu = 0$. L'h licit  magn tique, introduite par Woltjer (1958), $\eta_{\text{m}}^\mu t_\mu = 2B^\mu A_\mu$ est une mesure de l'enchev trement des lignes de champ magn tique.

4.2 Invariance de jauge

Nous avons contruit dans les sections pr c dentes un principe variationnel mais nous n'avons pas discut  de l'invariance de l'action lors d'une transformation de jauge, caract ris e par un changement $e^\mu \mapsto \check{e}^\mu = e^\mu + b^\mu$. Nous avons d j  montr  que dans une telle transformation certains tenseurs restent invariants comme la m trique $\gamma^{\mu\nu}$ ou le gradient du temps universel t_μ . En revanche la m trique covariante et le projecteur spatial se transforment comme

$$\check{\gamma}_{\mu\nu} = \gamma_{\mu\nu} - 2t_{(\mu}\gamma_{\nu)\rho}b^\rho + b^2t_\mu t_\nu, \quad \check{\gamma}_\nu^\mu = \gamma_\nu^\mu - t_\nu b^\mu. \quad (4.120)$$

Alors que la 4-vitesse u^μ est indépendante du choix d'un référentiel inertiel, la vitesse v^μ dépend spécifiquement d'une décomposition aristotélienne et se transforme par les lois de Galilée

$$\check{v}^\mu = v^\mu - b^\mu. \quad (4.121)$$

Les composantes covariantes de la vitesse ont une loi de transformation plus compliquée du fait que cette vitesse est orthogonal à e^μ

$$\check{v}_\mu = v_\mu - \gamma_{\mu\nu}b^\nu + t_\mu(b^2 - b^\nu v_\nu). \quad (4.122)$$

Autrement dit dans des coordonnées aristotéliennes, la composante temporelle covariante de la 3-vitesse n'est pas nécessairement nulle en général $\check{v}_0 \neq 0$, contrairement à son homologue contravariant $v^0 = 0$. De ces deux transformations, nous pouvons obtenir celle de la norme de la vitesse $v^2 = v^\mu v_\mu$

$$\check{v}^2 = v^2 - 2b_\mu v^\mu + b^2, \quad (4.123)$$

puis celle de l'impulsion cinétique

$$\check{p}_\mu = p_\mu - m\gamma_{\mu\nu}b^\nu + \frac{1}{2}mb^2t_\mu \quad (4.124)$$

et enfin, en utilisant la transformation (3.56), celle de l'impulsion généralisée (4.60)

$$\check{\pi}_\mu = \pi_\mu - m\gamma_{\mu\nu}b^\nu + \left(\frac{1}{2}mb^2 - m\alpha\right)t_\mu. \quad (4.125)$$

Par conséquent le lagrangien L se transforme comme $L \mapsto \check{L}$

$$\check{L} = L - mu^\mu\gamma_{\mu\nu}b^\nu + \frac{1}{2}mb^2 - m\alpha, \quad (4.126)$$

soit en fonction du potentiel β , en remarquant que $\gamma_{\mu\nu}u^\mu = v_\nu$ et que $\alpha = e^\mu\nabla_\mu\beta$

$$\check{L} = L - mv_\mu b^\mu + \frac{1}{2}mb^2 - me^\mu\nabla_\mu\beta = L - mu^\mu\nabla_\mu\beta + \frac{1}{2}mb^2. \quad (4.127)$$

En définissant un nouveau potentiel $\hat{\beta}$ tel que

$$\nabla_\nu\hat{\beta} = \nabla_\nu\beta - \frac{1}{2}b^2t_\nu, \quad (4.128)$$

la transformation de la densité lagrangienne peut alors se simplifier avec $\rho^\mu = mn^\mu$ (l'énergie interne U_{int} est invariante de jauge) sous la forme

$$\check{\Lambda} = \Lambda - \rho^\mu\nabla_\mu\hat{\beta}. \quad (4.129)$$

La redéfinition (4.128) est légitime puisqu'elle ne modifie ni b^μ ni a^μ .

Par conséquent, l'effet d'un changement de référentiel inertiel sur l'action $\mathcal{A} = \int d^4x \Lambda$, en utilisant

$$\rho^\mu \nabla_\mu \hat{\beta} = \nabla_\mu (\hat{\beta} \rho^\mu) - \hat{\beta} \nabla_\mu \rho^\mu \tag{4.130}$$

et en supposant que le courant de masse est conservé $\nabla_\mu \rho^\mu = 0$, est simplement par le théorème de Green un terme de « surface »¹ (les deux extrémités de la trajectoire pour une particule ponctuelle)

$$\check{\mathcal{A}} = \mathcal{A} - \oint \rho^\mu \hat{\beta} dS_\mu, \tag{4.131}$$

l'élément covariant de la 3-surface infinitésimal dS_μ est défini par le dual de Hodge de $dS^{\mu\nu\rho} = 3! dx_1^\mu dx_2^\nu dx_3^\rho$ soit

$$dS_\mu = \frac{1}{3!} \varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} dS^{\nu\rho\sigma} = \varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} dx_1^\nu dx_2^\rho dx_3^\sigma. \tag{4.132}$$

Ce terme supplémentaire n'affecte pas la variation locale de l'action, puisque dans une telle variation le champ de déplacement infinitésimal ξ^μ est nul sur les bords du domaine (les extrémités de la trajectoire sont fixes pour une particule ponctuelle) donc $\delta \check{\mathcal{A}} = \delta \mathcal{A}$. Cette invariance de l'action dans une transformation de jauge garantit que les équations déduites du principe variationnel satisferont le principe de relativité (pas seulement galiléenne mais aussi au sens de Milne). Nous pouvons d'ailleurs le vérifier directement sur l'équation d'Euler (4.67).

Remarquons enfin qu'une transformation de jauge ne modifie pas le rang d'un tenseur et par conséquent, changement de système coordonnées et changement de jauge commutent.

4.3 Mélange de fluides parfaits

Nous allons maintenant généraliser la discussion précédente au cas d'un mélange de fluides parfaits. Chaque fluide sera étiqueté par un indice chimique x . La différence essentielle entre un mélange de fluides et un fluide simple, est l'*effet d'entraînement* de Andreev & Bashkin (1975). Cet effet se manifeste par le fait que l'impulsion d'un fluide n'est en général pas alignée avec le courant correspondant. Cela provient du fait que l'énergie interne U_{int} et par suite la densité lagrangienne Λ_{int} pour un mélange de fluides peut dépendre non seulement des densités de chaque fluide (comme dans le cas barotrope) mais également des courants des fluides. Cette contribution à la densité lagrangienne totale ne peut dépendre que des *différences* entre les vitesses sinon cela violerait le principe de relativité². Il est important de souligner que cet effet est non dissipatif, c'est pourquoi il est plus facile à mettre en évidence dans les superfluides³.

¹dans l'espace-temps à quatre dimensions!

²Il serait néanmoins toujours possible de considérer une densité d'énergie qui ne soit pas invariante de jauge, mais dont la transformation de jauge donne lieu à une divergence totale.

³L'effet d'entraînement fut initialement mis en évidence dans les mélanges superfluides ^3He - ^4He .

La généralisation du principe variationnel pour un mélange de fluides est très naturelle. Il suffit d'ajouter les contributions de chaque fluide à la densité lagrangienne et de procéder ensuite à des variations indépendantes de chacun des fluides. La densité lagrangienne totale est la somme d'une contribution matérielle et d'une contribution gravitationnelle

$$\Lambda = \Lambda_{\text{mat}} + \Lambda_{\text{pot}}. \quad (4.133)$$

Le terme gravitationnel Λ_{pot} est simplement donné par

$$\Lambda_{\text{pot}} = -\rho\phi, \quad (4.134)$$

comme pour un seul fluide mais ici ρ est la densité *totale* de masse

$$\rho = \sum_{\text{x}} m^{\text{x}} n_{\text{x}}, \quad (4.135)$$

soit sous forme covariante

$$\rho = \sum_{\text{x}} m^{\text{x}} n_{\text{x}}^{\mu} t_{\mu}, \quad (4.136)$$

m^{x} étant la masse par particule du fluide considéré. La densité lagrangienne matérielle Λ_{mat} se décompose en une partie purement cinétique et une partie interne

$$\Lambda_{\text{mat}} = \Lambda_{\text{cin}} + \Lambda_{\text{int}}. \quad (4.137)$$

L'énergie cinétique totale est simplement la somme des énergies cinétiques de chaque fluide

$$\Lambda_{\text{cin}} = \sum_{\text{x}} n_{\text{x}}^{\mu} p_{\mu}^{\text{x}}, \quad (4.138)$$

où l'impulsion cinétique p_{μ}^{x} de chaque fluide est définie comme dans le cas d'un seul fluide par (4.10)

$$p_{\mu}^{\text{x}} = m^{\text{x}} v_{\text{x}\mu} - \frac{1}{2} m^{\text{x}} v_{\text{x}}^2 t_{\mu}. \quad (4.139)$$

Contrairement au cas d'un seul fluide, la densité d'énergie interne U_{int} et par suite Λ_{int} , dépend éventuellement des courants n_{x}^{μ} . La variation de Λ_{int} définit une impulsion chimique χ_{μ}^{x} par

$$\delta\Lambda_{\text{int}} \equiv \sum_{\text{x}} \chi_{\mu}^{\text{x}} \delta n_{\text{x}}^{\mu}, \quad (4.140)$$

dont la composante temporelle s'interprète comme l'opposé du potentiel chimique du fluide considéré. L'invariance de la densité d'énergie interne dans des transformations de Galilée ou de Milne garantit l'invariance de jauge de l'impulsion chimique. Il est cependant important de noter que cela ne signifie pas l'invariance des composantes, prises séparément ! Le potentiel chimique χ^{x} d'un fluide par exemple, qui est égale à $\chi^{\text{x}} \equiv -e^{\mu} \chi_{\mu}^{\text{x}}$ se

transforme comme $\chi^x \mapsto \check{\chi}^x = \chi^x - b^\mu \chi_\mu^x$ dans un autre référentiel. La variation de la densité lagrangienne matérielle peut alors s'écrire sous la forme

$$\delta\Lambda_{\text{mat}} = \sum_x \mu_\nu^x \delta n_x^\nu, \quad (4.141)$$

où l'impulsion matérielle μ_ν^x est définie par

$$\mu_\nu^x \equiv p_\nu^x + \chi_\nu^x. \quad (4.142)$$

La variation de la densité lagrangienne totale Λ s'exprime finalement comme

$$\delta\Lambda = \sum_x \pi_\nu^x \delta n_x^\nu - \rho \delta\phi, \quad (4.143)$$

où l'impulsion généralisée π_ν^x est définie par

$$\pi_\nu^x \equiv \frac{\partial\Lambda}{\partial n_x^\nu}, \quad (4.144)$$

soit

$$\pi_\nu^x = \mu_\nu^x - m^x \phi t_\mu. \quad (4.145)$$

L'impulsion chimique χ_μ^x dépend en général des courants de *tous* les fluides, par conséquent l'impulsion généralisée π_μ^x n'est pas alignée avec le courant correspondant n_x^μ comme dans le cas d'un seul fluide parfait : c'est l'effet d'entraînement.

Nous allons introduire une pression généralisée Ψ définie par analogie avec l'équation (4.64) pour un seul fluide

$$\Psi \equiv \Lambda_{\text{int}} - \sum_x n_x^\mu \chi_\mu^x, \quad (4.146)$$

dont la variation est donnée par

$$\delta\Psi = - \sum_x n_x^\mu \delta\chi_\mu^x. \quad (4.147)$$

Il est facile de voir que cette pression généralisée peut être définie de façon équivalente par

$$\Psi = \Lambda_{\text{mat}} - \sum_x n_x^\nu \mu_\nu^x, \quad (4.148)$$

ou encore

$$\Psi = \Lambda - \sum_x n_x^\nu \pi_\nu^x. \quad (4.149)$$

La densité lagrangienne totale s'écrit ainsi sous une forme analogue à celle d'un seul fluide (4.63) par

$$\Lambda = \sum_x n_x^\nu \pi_\nu^x + \Psi. \quad (4.150)$$

Les équations gouvernant l'écoulement de chacun des fluides, s'obtiennent par minimisation de l'action

$$\mathcal{A} = \int d^4x \Lambda \quad (4.151)$$

dans des champs de déplacement infinitésimaux *indépendants* ξ_x^μ (qui s'annulent sur les bords du domaine d'intégration). La généralisation du cas fluide simple est immédiate. Ainsi la variation de la densité lagrangienne est donnée par

$$\delta\Lambda = \nabla_\mu (2\pi_\nu^x n_x^{[\mu} \xi_x^{\nu]}) - f_\mu^x \xi_x^\mu - \rho\delta\phi, \quad (4.152)$$

où le covecteur f_μ^x est la 4-densité de force s'exerçant sur le fluide x

$$f_\mu^x = n_x^\nu \varpi_{\nu\mu}^x + \pi_\mu^x \nabla_\nu n_x^\nu, \quad (4.153)$$

où la vorticit  g n ralis e est d finie comme la d riv e ext rieure de l'impulsion g n ralis e

$$\varpi_{\mu\nu}^x \equiv 2\nabla_{[\mu} \pi_{\nu]}^x. \quad (4.154)$$

Comme l' nergie interne est invariante de jauge, la densit  lagrangienne se transforme de la m me fa on que dans le cas d'un seul fluide (4.129), lors d'un changement de r f rentiel $\Lambda \mapsto \check{\Lambda}$ avec

$$\check{\Lambda} = \Lambda - \rho^\mu \nabla_\mu \hat{\beta}, \quad (4.155)$$

  la diff rence pr s que ρ^μ est ici la densit  totale de masse. La variation de l'action ne sera donc pas affect e par une transformation de jauge si le courant total de masse est conserv 

$$\nabla_\mu \rho^\mu = 0. \quad (4.156)$$

La condition de stationnarit  de l'action (4.151) pour des champs de d placements arbitraires ξ_x^μ conduit simplement, d'apr s (4.152),   $f_\mu^x = 0$, d'o  nous obtenons les  quations de l' coulement lorsque les courants sont individuellement conserv s

$$n_x^\nu \varpi_{\nu\mu}^x = 0. \quad (4.157)$$

4.3.1 Application au mod le de Tisza-Landau   deux fluides

En 1938, Tisza proposait un mod le   deux fluides pour expliquer les propri t s inhabituelles de l'h lium liquide   des temp ratures en dessous de 2.2 K (couramment not  h lium II ou He II), dont l'absence de viscosit  dans certaines exp riences et un comportement classique dans d'autres. C'est Kapitza qui introduisit le terme de superfluide en r f rence   la supraconductivit  d couverte en 1911 par Kamerlingh Onnes. Le mod le   deux fluides fut ensuite largement d velopp  par Landau (voir Landau & Lifshitz (1989)).

Dans ce mod le, l'h lium liquide est repr sent  par un m lange de deux fluides, d'une part une composante superfluide et d'autre part une composante dite normale associ e aux excitations des modes collectifs du syst me (des phonons   basse fr quence, et des rotons   plus haute fr quence), qui porte   elle seule toute l'entropie du liquide. Le courant

$n_N^\mu = s^\mu$ de la composante normale est défini par $s^\mu = su_N^\mu$, où s est la densité d'entropie s et u_N^μ la vitesse de propagation des excitations (vitesse du son). Comme le transport d'entropie n'est pas associé à un transport de masse ¹, les excitations sont de masse nulle donc $m^N = 0$. Traditionnellement, le superfluide est caractérisé par un champ de vitesse \vec{v}_s irrotationnel. Il s'avère que cette vitesse superfluide est en réalité une impulsion. Afin d'éviter toute confusion de ce genre, nous définissons le courant n^μ du superfluide par le courant $n^\mu = nu^\mu$ des atomes d'hélium de masse m , de densité n et de quadrivitesse u^μ . Nous supposons que chaque fluide est séparément conservé

$$\nabla_\mu n^\mu = 0, \quad \nabla_\mu s^\mu = 0. \tag{4.158}$$

La conservation du fluide normal signifie que nous négligeons toute dissipation.

Le superfluide est supposé irrotationnel, ce qui se traduit par la condition que la vorticité généralisée (4.154) soit nulle

$$\varpi_{\mu\nu} = 0, \quad 2\nabla_{[\mu}\pi_{\nu]} = 0. \tag{4.159}$$

En décomposition 3 + 1 et en notant les vecteurs par des flèches, cette condition fournit deux types d'équations correspondant aux composantes ϖ_{0i} et ϖ_{ij} de la vorticité généralisée :

$$\text{rôt } \vec{\pi} = \vec{0}, \tag{4.160}$$

$$\partial_t \vec{\pi} + \vec{\nabla} \mathcal{E} = \vec{0}. \tag{4.161}$$

L'impulsion généralisée $\vec{\pi}$ est définie par l'équation (4.144) et s'écrit sous la forme

$$\vec{\pi} = m\vec{v} + \vec{\chi}, \tag{4.162}$$

où $\vec{\chi}$ est l'impulsion chimique (4.140) et \vec{v} la 3-vitesse des atomes d'hélium. Cette expression montre que l'impulsion et la vitesse du superfluide ne sont pas alignées et il est donc important de bien distinguer les deux. Nous avons également introduit l'énergie par atome $\mathcal{E} = -\pi_\mu e^\mu$ dans le référentiel par rapport auquel le fluide s'écoule avec une vitesse \vec{v} . Nous pouvons exprimer l'énergie sous la forme

$$\mathcal{E} = \chi + \frac{1}{2}mv^2 + m\phi, \tag{4.163}$$

où $\chi \equiv -\chi_\mu e^\mu$ est le potentiel chimique du fluide dans le référentiel en question. La vitesse superfluide s'identifie avec l'impulsion généralisée

$$\vec{v}_s \equiv \frac{\vec{\pi}}{m}. \tag{4.164}$$

L'équation d'Euler pour le fluide normal, s'écrit en notant $\Theta_\mu = \pi_\mu^N$ l'impulsion correspondante

$$s^\mu \varpi_{\mu\nu}^N = 0, \quad \varpi_{\mu\nu}^N = 2\nabla_{[\mu}\Theta_{\nu]}. \tag{4.165}$$

¹La propagation d'une excitation d'un mode collectif, comme par exemple une onde sonore dans l'air ou dans un solide, est le déplacement non pas de matière mais d'une perturbation.

En décomposition $3 + 1$, ces équations deviennent, en notant $\Theta \equiv \Theta_\mu e^\mu$

$$\partial_t \vec{\Theta} - \vec{v}_N \times \text{rot } \vec{\Theta} - \vec{\nabla} \Theta = 0, \quad (4.166)$$

$$\vec{v}_N \cdot \partial_t \vec{\Theta} = \vec{v}_N \cdot \vec{\nabla} \Theta. \quad (4.167)$$

Nous pouvons remarquer d'après les équations (4.139), (4.142) et (4.144) que l'impulsion chimique du fluide normal, χ_μ^N coïncide avec l'impulsion Θ_μ puisque ce fluide est sans masse. De plus, le potentiel chimique du fluide normal dans son référentiel est par définition la température T , donc nous avons

$$T = -\Theta_\mu u_N^\mu = -\Theta - \vec{v}_N \cdot \vec{\Theta}. \quad (4.168)$$

Les impulsions chimiques $\vec{\chi}^N = \vec{\Theta}$ et $\vec{\chi}$ ne sont pas complètement indépendantes. En effet, d'après le principe de relativité, l'énergie interne ne peut dépendre que de la vitesse relative entre les deux fluides, $\vec{\Delta} \equiv \vec{v} - \vec{v}_N$ (en adoptant les notations de Prix (2000)). Par conséquent, la contribution Λ_{int} à la densité lagrangienne ne peut dépendre que de $\vec{\Delta}^2$ et nous avons

$$\vec{\chi} = \frac{\partial \Lambda_{\text{int}}}{\partial \Delta^2} \frac{2}{n} \vec{\Delta}, \quad \vec{\Theta} = -\frac{\partial \Lambda_{\text{int}}}{\partial \Delta^2} \frac{2}{s} \vec{\Delta} \quad (4.169)$$

d'où nous en déduisons la relation

$$n\vec{\chi} + s\vec{\Theta} = \vec{0}. \quad (4.170)$$

Nous verrons dans la suite de ce chapitre comment généraliser cette relation pour un nombre arbitraire de fluides. En utilisant cette relation, nous obtenons pour la vitesse superfluide

$$\vec{v}_s = (1 + \lambda)\vec{v} - \lambda\vec{v}_N, \quad \lambda \equiv \frac{2}{\rho} \frac{\partial \Lambda_{\text{int}}}{\partial \Delta^2}. \quad (4.171)$$

Avec cette expression nous pouvons écrire le courant de masse, qui est conservé d'après l'équation (4.156), comme la somme d'une contribution superfluide et d'une contribution normale

$$\rho \vec{v} = \rho_s \vec{v}_s + \rho_N \vec{v}_N, \quad (4.172)$$

en introduisant les traditionnelles densités superfluides ρ_s et normales ρ_N par

$$\rho_s \equiv \frac{1}{1 + \lambda} \rho, \quad \rho_N \equiv \frac{\lambda}{1 + \lambda} \rho, \quad (4.173)$$

dont la somme est bien égale à la densité de masse totale $\rho = \rho_s + \rho_N$.

En définissant un potentiel chimique superfluide par analogie avec (4.163)

$$\chi_s \equiv \mathcal{E} - \frac{1}{2} m v_s^2 - m \phi, \quad (4.174)$$

nous pouvons ainsi obtenir une équation de type Euler pour le champ de vitesse superfluide \vec{v}_s (voir Landau & Lifshitz (1989)),

$$\text{rot } \vec{v}_s = \vec{0}, \quad m \partial_t \vec{v}_s + \vec{\nabla} (\chi_s + \frac{1}{2} m v_s^2 + m \phi) = \vec{0}. \quad (4.175)$$

4.3.2 Théorème de Kelvin-Helmholtz généralisé

Par un raisonnement similaire à celui qui a conduit au théorème de Kelvin-Helmholtz pour un fluide simple, il est facile de voir que la vorticit  de l'un fluide sera conserv e le long du courant correspondant,   condition que la force qu'il subit soit nulle $f_\mu^x = 0$ et que le courant soit conserv  $\nabla_\mu n_x^\mu = 0$, c'est- -dire que le fluide satisfait une  quation de type Euler $n_x^\nu \varpi_{\nu\mu}^x = 0$. Plus pr cis ment, nous avons pour l'esp ce chimique x

$$\zeta^x \vec{u}_x \mathcal{L} \varpi_{\mu\nu}^x = 0, \tag{4.176}$$

pour n'importe quel champ scalaire ζ^x . Dans ce cas la circulation de l'impulsion g n ralis e le long de n'importe quel contour fluide ferm ,

$$\mathcal{C}^x \equiv \oint d\vec{l}] \mathcal{I}^x = \oint dx^\mu \pi_\mu^x, \tag{4.177}$$

est conserv e.

4.3.3 H licit  d'un m lange de fluides

Nous pouvons g n raliser le concept d'h licit  pour un m lange de fluide en introduisant le vecteur

$$\eta^{xy\mu} = \frac{1}{2} \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \pi_{x\nu}^x \varpi_{\rho\sigma}^y. \tag{4.178}$$

Dans le cas o  un fluide, disons x , ob it   l' quation d'Euler $n_x^\nu \varpi_{\nu\mu}^x = 0$ alors la composante diagonale dans les indices chimiques du courant d'h licit  sera conserv e

$$\nabla_\mu \eta^{xx\mu} = 0. \tag{4.179}$$

La partie purement antisym trique par rapport aux indices chimiques du courant d'h licit , peut s' crire sous la forme d'une divergence

$$\eta^{[xy]\mu} = \frac{1}{2} \nabla_\nu (\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \pi_{\rho}^y \pi_{\sigma}^x), \tag{4.180}$$

de telle sorte que le courant associ  est automatiquement conserv 

$$\nabla_\mu \eta^{[xy]\mu} = 0. \tag{4.181}$$

Dans le cas o  l'un des fluides, disons x , est irrotationnel le courant $\eta^{yx\mu}$ sera  videmment nul quelque soit y . Dans le cas particulier o  le fluide en question est superfluide, c'est- -dire que $\pi_{x\mu}^x = \nabla_\mu \varphi^x$, alors le courant d'h licit  sera conserv 

$$\nabla_\mu \eta^{xy\mu} = 0. \tag{4.182}$$

4.3.4 Fluides chargés

Supposons que chaque fluide possède une charge électrique q^x , à laquelle est associé un courant électrique $j_x^\mu \equiv q^x n_x^\mu$. Le mélange de fluides est de plus soumis à un champ électromagnétique, caractérisé par un covecteur A_μ . Le couplage des fluides à ce champ a pour effet d'ajouter une contribution à la densité lagrangienne, de la forme

$$\Lambda_{\text{em}} \equiv j^\mu A_\mu, \quad (4.183)$$

où j^μ est le courant électrique total

$$j^\mu \equiv \sum q^x n_x^\mu. \quad (4.184)$$

Le courant électrique total d'un mélange de fluide électriquement neutre est ainsi purement spatial $j^\mu t_\mu = \sum q^x n_x = 0$.

La variation de la densité lagrangienne en ajoutant la contribution électromagnétique s'écrit maintenant

$$\delta\Lambda = \sum_x \pi_\nu^x \delta n_x^\nu - \rho \delta\phi + j^\nu \delta A_\nu, \quad (4.185)$$

avec l'impulsion généralisée donnée par

$$\pi_\nu^x = \mu_\nu^x - m^x \phi t_\mu + q^x A_\mu. \quad (4.186)$$

Considérant des variations convectives, nous avons

$$\delta\Lambda_{\text{tot}} = \nabla_\mu \left(2 \sum_x \pi_\nu^x n_x^{[\mu} \xi^{\nu]} \right) - \sum_x f_\mu^x \xi_x^\mu - \rho \delta\phi + j^\nu \delta A_\nu, \quad (4.187)$$

avec la densité de force définie par

$$f_\mu^x = n_x^\nu \Omega_{\nu\mu}^x + \pi_{\nu\mu}^x \nabla_\nu n_x^\nu. \quad (4.188)$$

La vorticit   g  n  ralis  e

$$\Omega_{\nu\mu}^x = 2\nabla_{[\nu} \pi_{\mu]}^x, \quad (4.189)$$

contient d  sormais une contribution magn  tique

$$\Omega_{\nu\mu}^x = \varpi_{\nu\mu}^x + q^x F_{\nu\mu}. \quad (4.190)$$

Le tenseur de Maxwell $F_{\mu\nu} \equiv 2\nabla_{[\mu} A_{\nu]}$ est donc une source de vorticit   pour le fluide.

En supposant que les courants sont s  par  ment conserv  s, i.e. $\nabla_\nu n_x^\nu = 0$, les   quations des fluides s'  crivent

$$f_\mu^x = n_x^\nu \Omega_{\nu\mu}^x. \quad (4.191)$$

Lorsque le principe variationnel est satisfait, ces   quations se r  duisent    des   quations de type Euler qui s'expriment en termes de la vorticit   en l'absence de champ   lectromagn  tique $\varpi_{\nu\mu}^x$ comme

$$n_x^\nu \varpi_{\nu\mu}^x = -j_x^\nu F_{\nu\mu}. \quad (4.192)$$

Il reste encore à déterminer quelle est la forme de la transformation de jauge pour le potentiel électromagnétique A_μ . A cette fin, écrivons la densité lagrangienne après un changement de référentiel caractérisé par un potentiel de jauge β :

$$\check{\Lambda}_{\text{tot}} = \Lambda_{\text{tot}} - \sum m^x n_x^\nu \nabla_\nu \beta + \sum q^x n_x^\nu (\check{A}_\nu - A_\nu). \quad (4.193)$$

Le premier terme est une divergence pure et n'affecte donc pas le principe variationnel à condition que les courants soient conservés $\nabla_\nu n_x^\nu = 0$. Il est de même pour le second terme si le covecteur électromagnétique se transforme comme

$$\check{A}_\nu = A_\nu + \nabla_\nu \Phi, \quad (4.194)$$

(où Φ est un champ scalaire) puisque la densité lagrangienne peut alors s'écrire

$$\check{\Lambda}_{\text{tot}} = \Lambda_{\text{tot}} + \nabla_\nu (j^\nu \Phi - \rho^\nu \beta). \quad (4.195)$$

4.3.5 Dynamique du champ de gravitation

Jusqu'à présent nous avons traité le champ de gravitation comme un champ donné. Nous pouvons l'inclure dans le principe variationnel et le considérer comme un champ dynamique en ajoutant un terme de source dans la densité lagrangienne, donné par

$$\Lambda_{\text{grf}} \equiv \frac{1}{8\pi G} g^{\mu\nu} \nabla_\mu \phi, \quad (4.196)$$

où G est la constante de Cavendish. La densité lagrangienne totale peut ainsi s'écrire comme $\Lambda_{\text{tot}} = \Lambda_{\text{cin}} + \Lambda_{\text{int}} + \Lambda_{\text{grt}}$ où la contribution gravitationnelle totale est définie par $\Lambda_{\text{grt}} = \Lambda_{\text{grf}} + \Lambda_{\text{pot}}$. Le terme Λ_{pot} représente le couplage entre le mélange de fluides et le champ gravitationnel. La minimisation de l'action $\mathcal{A} = \int d^4x \Lambda_{\text{tot}}$ par rapport à des variations *arbitraires* du potentiel ϕ mène à l'équation de Poisson

$$\gamma^{\mu\nu} \nabla_\mu \nabla_\nu \phi = 4\pi G \rho. \quad (4.197)$$

Dans une transformation de jauge, la contribution gravitationnelle de source se transforme comme

$$\check{\Lambda}_{\text{grf}} = \Lambda_{\text{grf}} + \frac{1}{8\pi G} (g^\mu \nabla_\mu \alpha - a^\mu \nabla_\mu \phi - a^\mu \nabla_\mu \alpha), \quad (4.198)$$

puisque $\check{g}^\mu = g^\mu - a^\mu$ et $\check{\phi} = \phi + \alpha$ ¹. En utilisant la propriété (3.58) que $\gamma^{\mu\nu} \nabla_\mu \nabla_\nu \alpha = 0$, la nouvelle densité lagrangienne (4.198) peut se réécrire sous la forme d'une divergence

$$\check{\Lambda}_{\text{grf}} = \Lambda_{\text{grf}} - \nabla_\mu \left(\frac{1}{8\pi G} \gamma^{\mu\nu} (\alpha \nabla_\nu \alpha + 2\phi \nabla_\nu \alpha) \right), \quad (4.199)$$

¹Les dérivées covariantes se transforment également par l'intermédiaire de la connexion, mais puisque seules n'interviennent des dérivées de champ scalaire elles restent invariantes.

qui n'affecte donc pas des variations locales du potentiel gravitationnel et assure par conséquent, l'invariance des équations obtenues non seulement dans des transformations de Galilée mais aussi dans des transformations plus générales de Milne.

Nous pourrions également être tenté de considérer le champ électromagnétique comme une variable dynamique. Seulement à la différence du champ gravitationnel, il n'est pas possible d'inclure un terme de source dans la densité lagrangienne sans violer le principe de relativité. En effet les équations de Maxwell sont invariantes sous des transformations de Lorentz et ne sont donc pas compatibles avec la théorie de Newton. C'est la découverte de cette nouvelle invariance qui a conduit Einstein à élaborer la théorie de la relativité restreinte en 1905.

4.4 Tenseur énergie-impulsion

Nous avons précédemment établi les équations (4.153) de l'écoulement des fluides, ainsi que l'équation (4.197) du champ gravitationnel. Nous allons maintenant établir une loi de conservation, $\nabla_\mu T_{\text{tot}}^{\mu\nu} = 0$, dans laquelle $T_{\text{tot}}^{\mu\nu}$ est un tenseur symétrique, appelé le tenseur énergie-impulsion. En relativité générale, ce tenseur s'obtient à partir de la densité lagrangienne Λ_{tot} par la prescription suivante

$$T_{\text{tot}}^{\mu\nu} \equiv \frac{2}{\sqrt{-g}} \frac{\delta \sqrt{-g} \Lambda_{\text{tot}}}{\delta g_{\mu\nu}}, \quad (4.200)$$

où g désigne simplement le déterminant de la métrique $g_{\mu\nu}$. Nous pouvons ensuite monter ou descendre les indices avec la métrique pour obtenir la version covariante ou mixte de ce tenseur. Le tenseur de mesure du 4-volume est donné par $\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} = \sqrt{-g} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$. La contribution gravitationnelle à la densité lagrangienne est simplement donnée par le terme de Hilbert

$$\Lambda_{\text{grf}} \equiv \frac{c^3}{16\pi G} R \sqrt{-g}, \quad (4.201)$$

où R désigne la courbure scalaire. Dans le cas newtonien, nous ne disposons pas d'une métrique à proprement parler puisque le tenseur $\gamma^{\mu\nu}$ est dégénéré. Pour obtenir le tenseur énergie-impulsion par une formule analogue à l'expression relativiste (4.200), il est donc nécessaire de considérer des variations de la densité lagrangienne par rapport à la métrique $\gamma^{\mu\nu}$ et aussi par rapport aux tenseurs t_μ et e^μ qui caractérisent la dégénérescence de la métrique.

4.4.1 Définition

Supposons que la densité lagrangienne totale soit la somme de plusieurs contributions (cinétique, gravitationnelle, etc) simplement dénotées ici par un indice a

$$\Lambda_{\text{tot}} = \sum_a \Lambda_a. \quad (4.202)$$

Lorsque les champs physiques sont solutions des équations dynamiques déduites du principe variationnel, la variation de la densité lagrangienne est nulle modulo une divergence dans une variation infinitésimale (nulle aux bords du domaine) de ces champs, ce que nous noterons $\delta' \Lambda_{\text{tot}} \cong 0$. Dans cette section, nous emploierons le symbole δ' pour une variation *physique* (variations convectives des courants et variation arbitraire du potentiel gravitationnel) par distinction avec une variation *arbitraire* δ . Afin d'obtenir une expression du tenseur énergie-impulsion, nous allons désormais considérer des variations générales dans lesquelles les tenseurs $\gamma^{\mu\nu}$, t_μ et e^μ qui définissent la structure de l'espace-temps newtonien, ne sont plus fixés et aussi des variations arbitraires des courants. Nous pouvons réécrire la variation physique de la densité lagrangienne sous la forme

$$\delta' \Lambda_{\text{tot}} = \delta \Lambda_{\text{tot}} - \sum_a \delta^\ddagger \Lambda_a - \sum_a \delta^\# \Lambda_a, \quad (4.203)$$

où δ^\ddagger est la variation des tenseurs de structure et $\delta^\#$ la différence entre une variation arbitraire des courants et une variation convective (c'est-à-dire une variation *induite* par un déplacement des particules de fluides), plus précisément

$$\delta^\ddagger \Lambda_a = \frac{\partial \Lambda_a}{\partial \gamma^{\mu\nu}} \delta \gamma^{\mu\nu} + \frac{\partial \Lambda_a}{\partial t_\mu} \delta t_\mu + \frac{\partial \Lambda_a}{\partial e^\mu} \delta e^\mu \quad (4.204)$$

$$\delta^\# \Lambda_a = \frac{\partial \Lambda_a}{\partial n_x^\mu} \delta^\# n_x^\mu. \quad (4.205)$$

Du fait des identités $t_\mu \gamma^{\mu\nu} = 0$ et $t_\mu e^\mu = 1$, il existe une certaine ambiguïté dans la définition des dérivées partielles par rapport aux tenseurs de structures, qui disparaît néanmoins dans la somme $\delta^\ddagger \Lambda_a$. En suivant la procédure de Trautman (1965) pour le cas relativiste, considérons des variations dans un champ de déplacement infinitésimal ξ^μ *quelconque*. Pour un champ scalaire, disons φ , la valeur du nouveau champ $\tilde{\varphi}\{x^\mu\}$ au point x^μ , est égale à la valeur de l'ancien champ au point $x^\mu - \xi^\mu$, autrement dit $\tilde{\varphi}\{x^\mu\} = \varphi\{x^\mu - \xi^\mu\}$. Par conséquent, la différence

$$\delta\varphi\{x^\mu\} \equiv \tilde{\varphi}\{x^\mu\} - \varphi\{x^\mu\} = -\xi^\mu \nabla_\mu \varphi = -\vec{\xi} \mathcal{L} \varphi. \quad (4.206)$$

Ceci revient donc à comparer la valeur du champs aux points $x^\mu - \xi^\mu$ et x^μ . Plus généralement, pour des champs de tenseurs d'ordre quelconque, la différence entre le nouveau et l'ancien champs, est donnée par la dérivée de Lie le long de $-\xi^\mu$:

$$-\delta \Lambda_a = \vec{\xi} \mathcal{L} \Lambda_a \equiv \xi^\rho \nabla_\rho \Lambda_a, \quad (4.207)$$

$$-\delta \gamma^{\mu\nu} = \vec{\xi} \mathcal{L} \gamma^{\mu\nu} \equiv \xi^\rho \nabla_\rho \gamma^{\mu\nu} - 2\gamma^{\rho(\mu} \nabla_\rho \xi^{\nu)}, \quad (4.208)$$

$$-\delta t_\mu = \vec{\xi} \mathcal{L} t_\mu \equiv \xi^\rho \nabla_\rho t_\mu + t_\rho \nabla_\mu \xi^\rho, \quad (4.209)$$

$$-\delta e^\mu = \vec{\xi} \mathcal{L} e^\mu \equiv \xi^\rho \nabla_\rho e^\mu - e^\rho \nabla_\rho \xi^\mu, \quad (4.210)$$

$$-\delta n_x^\mu = \vec{\xi} \mathcal{L} n_x^\mu \equiv \xi^\rho \nabla_\rho n_x^\mu - n_x^\rho \nabla_\rho \xi^\mu. \quad (4.211)$$

Les variations des tenseurs de structure se simplifie, en se rappelant que leur dérivée covariante est nulle

$$\delta\gamma^{\mu\nu} = 2\gamma^{\rho(\mu}\nabla_{\rho}\xi^{\nu)}, \quad (4.212)$$

$$\delta t_{\mu} = -t_{\rho}\nabla_{\mu}\xi^{\rho}, \quad (4.213)$$

$$\delta e^{\mu} = e^{\rho}\nabla_{\rho}\xi^{\mu}. \quad (4.214)$$

En comparant la variation convective du courant (4.46) avec l'expression générale (4.211), nous obtenons la relation

$$\delta^{\#}n_{\text{x}}^{\mu} = n_{\text{x}}^{\mu}\nabla_{\rho}\xi^{\rho}. \quad (4.215)$$

Nous pouvons finalement écrire la variation physique de la densité lagrangienne sous la forme

$$\delta'\Lambda_{\text{tot}} = T_{\text{tot}\nu}^{\mu}\nabla_{\mu}\xi^{\nu} - \nabla_{\rho}(\Lambda_{\text{tot}}\xi^{\rho}), \quad (4.216)$$

où le tenseur $T_{\text{tot}\nu}^{\mu}$ se décompose en une somme

$$T_{\text{tot}\nu}^{\mu} \equiv \sum_a T_{a\nu}^{\mu}, \quad (4.217)$$

dans laquelle chaque contribution est définie par

$$T_{a\nu}^{\mu} \equiv \left(\Lambda_a - \frac{\partial\Lambda_a}{\partial n_{\text{x}}^{\mu}} n_{\text{x}}^{\mu} \right) \delta_{\nu}^{\mu} - 2 \frac{\partial\Lambda_a}{\partial\gamma^{\rho\nu}} \gamma^{\rho\mu} + \frac{\partial\Lambda_a}{\partial t_{\mu}} t_{\nu} - \frac{\partial\Lambda_a}{\partial e^{\nu}} e^{\mu}. \quad (4.218)$$

Nous sommes ainsi parvenus à réexprimer la variation physique (4.203) de la densité lagrangienne sous la forme

$$\delta'\Lambda_{\text{tot}} \cong T_{\text{tot}\nu}^{\mu}\nabla_{\mu}\xi^{\nu}. \quad (4.219)$$

L'application du principe variationnel, c'est-à-dire la minimisation de l'action $\mathcal{A} = \int d^4x \Lambda_{\text{tot}}$ impose que ¹

$$\delta'\mathcal{A} = \int d^4x \delta'\Lambda_{\text{tot}} = 0, \quad (4.220)$$

soit

$$\int d^4x T_{\text{tot}\nu}^{\mu}\nabla_{\mu}\xi^{\nu} = 0, \quad (4.221)$$

puisque les termes de divergence se réduisent à des intégrales sur les bords du domaine, sur lesquels le déplacement est nul. Or puisque le champ de déplacement ξ^{μ} est arbitraire, ceci n'est satisfait que si le tenseur $T_{\text{tot}\nu}^{\mu}$ est conservé

$$\nabla_{\mu}T_{\text{tot}\nu}^{\mu} = 0. \quad (4.222)$$

¹Puisque nous procédons ici à une variation physique de l'action, la mesure de 4-volume est fixée.

Ce tenseur énergie-impulsion peut encore se réécrire

$$T_{\text{tot}}^{\mu\nu} = \sum_a \Psi_a \delta_\nu^\mu - 2 \frac{\partial \Lambda_a}{\partial \gamma^{\rho\nu}} \gamma^{\rho\mu} + \frac{\partial \Lambda_a}{\partial t_\mu} t_\nu - \frac{\partial \Lambda_a}{\partial e^\nu} e^\mu, \quad (4.223)$$

en terme de la pression généralisée

$$\Psi_a = \Lambda_a - \sum_x \pi_{a\mu}^x n_x^\mu, \quad (4.224)$$

et de l'impulsion généralisée

$$\pi_{a\mu}^x = \frac{\partial \Lambda_a}{\partial n_x^\mu}. \quad (4.225)$$

Nous avons par exemple noté dans les sections précédentes, $\pi_{\text{cin}\mu}^x = p_\mu^x$ et $\pi_{\text{mat}\mu}^x = \mu_\mu^x$. L'expression du tenseur énergie-impulsion peut s'écrire uniquement en termes des champs physiques par les identités de Noether que nous allons démontrer.

4.4.2 Identités de Noether

L'identité de Noether s'écrit

$$\frac{\partial \Lambda_a}{\partial (\phi_{,\mu})} \nabla_\nu \phi - \sum_x \pi_{a\nu}^x n_x^\mu - 2 \frac{\partial \Lambda_a}{\partial \gamma^{\rho\nu}} \gamma^{\rho\mu} + \frac{\partial \Lambda_a}{\partial t_\mu} t_\nu - \frac{\partial \Lambda_a}{\partial e^\nu} e^\mu = 0. \quad (4.226)$$

Pour mettre en évidence cette identité *mathématique*, nous ne devons faire aucune hypothèse physique (comme se restreindre à des variations convectives) et considérer des variations complètement *générales* des champs physiques et des tenseurs de structure :

$$\delta \Lambda_a = \delta^\ddagger \Lambda_a + \sum_x \pi_{a\mu}^x \delta n_x^\mu + \frac{\partial \Lambda_a}{\partial \phi} \delta \phi + \frac{\partial \Lambda_a}{\partial (\phi_{,\mu})} \delta (\phi_{,\mu}). \quad (4.227)$$

En particulier dans le cas de variations engendrées par un champ de déplacement infinitésimal ξ^μ comme dans la section précédente, la variation du potentiel de gravitation et de son gradient s'écrivent simplement ¹

$$\delta \phi = -\vec{\xi} \mathcal{L} \phi = -\xi^\mu \nabla_\mu \phi \quad \delta \phi_{,\mu} = -\xi^\nu \nabla_\mu \nabla_\nu \phi - (\nabla_\mu \xi^\nu) (\nabla_\nu \phi). \quad (4.228)$$

En regroupant tous les termes, nous arrivons à l'égalité

$$\xi^\nu \left(\nabla_\nu \Lambda_a - \sum_x \pi_{a\mu}^x \nabla_\nu n_x^\mu - \frac{\partial \Lambda_a}{\partial \phi} \nabla_\nu \phi - \frac{\partial \Lambda_a}{\partial (\phi_{,\mu})} \nabla_\mu \nabla_\nu \phi \right)$$

¹ $\delta \phi_{,\mu} = \nabla_\mu \delta \phi$ puisque la dérivée covariante qui agit sur un champ scalaire est simplement une dérivée partielle.

$$= \left(\frac{\partial \Lambda_a}{\partial(\phi, \mu)} \nabla_\nu \phi - \sum_x \pi_{a\nu}^x n_x^\mu - 2 \frac{\partial \Lambda_a}{\partial \gamma^{\rho\mu}} \gamma^{\rho\mu} + \frac{\partial \Lambda_a}{\partial t_\mu} t_\nu - \frac{\partial \Lambda_a}{\partial e^\nu} e^\mu \right) \nabla_\mu \xi^\nu, \quad (4.229)$$

Comme le champ de déplacement ξ^μ est arbitraire, nous pouvons toujours en particulier choisir un déplacement localement uniforme ce qui implique à l'identité évidente

$$\nabla_\nu \Lambda_a = \sum_x \pi_{a\mu}^x \nabla_\nu n_x^\mu + \frac{\partial \Lambda_a}{\partial \phi} \nabla_\nu \phi + \frac{\partial \Lambda_a}{\partial(\phi, \mu)} \nabla_\mu \nabla_\nu \phi, \quad (4.230)$$

de même, en choisissant un déplacement localement nul mais de gradient non nul conduit à l'identité de Noether.

Nous pouvons maintenant utiliser l'identité (4.226) pour éliminer les dérivées partielles de la densité lagrangienne par rapport aux tenseurs de structure dans le tenseur énergie-impulsion (4.223)

$$T_{a\nu}^\mu = \Psi_a \delta_\nu^\mu + \sum_x \pi_{a\nu}^x n_x^\mu - \frac{\partial \Lambda_a}{\partial(\phi, \mu)} \nabla_\nu \phi. \quad (4.231)$$

La divergence de ce tenseur s'écrit

$$\nabla_\mu T_{a\nu}^\mu = \nabla_\nu \Lambda_a - \sum_x \nabla_\nu (\pi_{a\nu}^x n_x^\mu) + \sum_x \nabla_\mu (\pi_{a\nu}^x n_x^\mu) - \nabla_\mu \left(\frac{\partial \Lambda_a}{\partial(\phi, \mu)} \nabla_\nu \phi \right), \quad (4.232)$$

d'où en utilisant la première identité de Noether (4.230) pour le gradient de la densité lagrangienne

$$\begin{aligned} \nabla_\mu T_{a\nu}^\mu &= \frac{\partial \Lambda_a}{\partial \phi} \nabla_\nu \phi + \frac{\partial \Lambda_a}{\partial(\phi, \mu)} \nabla_\mu \nabla_\nu \phi - \sum_x (\nabla_\nu \pi_{a\mu}^x) n_x^\mu \\ &+ \sum_x (\nabla_\mu \pi_{a\nu}^x) n_x^\mu + \sum_x (\nabla_\mu n_x^\mu) \pi_{a\nu}^x - \nabla_\mu \left(\frac{\partial \Lambda_a}{\partial(\phi, \mu)} \nabla_\nu \phi \right). \end{aligned} \quad (4.233)$$

En introduisant la densité de force $f_{a\mu}^x$ associée à la densité lagrangienne Λ_a par

$$f_{a\mu}^x \equiv 2n_x^\nu \nabla_{[\nu} \pi_{a\mu]}^x + \pi_{a\mu}^x \nabla_\nu n_x^\nu, \quad (4.234)$$

et la dérivée eulérienne par rapport au potentiel de gravitation

$$\frac{\delta \Lambda_a}{\delta \phi} \equiv \frac{\partial \Lambda_a}{\partial \phi} - \nabla_\mu \left(\frac{\partial \Lambda_a}{\partial(\phi, \mu)} \right), \quad (4.235)$$

nous pouvons finalement écrire la divergence du tenseur énergie-impulsion total sous le forme

$$\nabla_\mu T_{\text{tot}\nu}^\mu = \sum_x f_\nu^x + \frac{\delta \Lambda_a}{\delta \phi} \nabla_\nu \phi \quad (4.236)$$

avec la densité de force totale définie par

$$f_{\nu}^{\text{x}} = \sum_a f_a^{\text{x}\nu}, \quad (4.237)$$

et

$$T_{\text{tot}\nu}^{\mu} = \Psi_{\text{tot}}\delta_{\nu}^{\mu} + \sum_x \pi_{\text{tot}\nu}^{\text{x}} n_x^{\mu} - \frac{\partial\Lambda_{\text{tot}}}{\partial(\phi_{,\mu})} \nabla_{\nu}\phi, \quad (4.238)$$

où la pression et l'impulsion généralisées totales sont simplement données par $\Psi_{\text{tot}} = \sum_a \Psi_a$ et $\pi_{\text{tot}\nu}^{\text{x}} = \sum_a \pi_a^{\text{x}\nu}$.

Dans l'application du principe variationnel, la densité de force totale est nulle, de même que la variation eulérienne par rapport au potentiel de gravitation (l'équation d'Euler-Lagrange est directement reconnaissable), nous retrouvons ainsi la loi de conservation énoncée dans la section précédente. Le terme de source du champ gravitationnel dans la densité lagrangienne Λ_{grf} est indépendant des courants de telle sorte que qu'il ne contribue pas à l'impulsion généralisée, $\pi_{\text{grf}\nu}^{\text{x}} = 0$ donc $\pi_{\text{tot}\nu}^{\text{x}} = \pi_{\nu}^{\text{x}}$. Le terme de pression correspondant est donc simplement $\Psi_{\text{grf}} = \Lambda_{\text{grf}}$. En outre le seule terme dans la densité lagrangienne qui dépende du gradient du potentiel gravitationnel est Λ_{grf} d'où

$$\frac{\partial\Lambda_{\text{tot}}}{\partial(\phi_{,\mu})} \nabla_{\nu}\phi = \frac{\partial\Lambda_{\text{grf}}}{\partial(\phi_{,\mu})} \nabla_{\nu}\phi = \frac{1}{4\pi G} g^{\mu} \nabla_{\nu}\phi. \quad (4.239)$$

Nous pouvons ainsi exprimer le tenseur énergie-impulsion en séparant la partie dynamique du champ gravitationnel

$$T_{\text{tot}\nu}^{\mu} = T_{\nu}^{\mu} + T_{\text{grf}\nu}^{\mu} \quad (4.240)$$

avec le tenseur énergie-impulsion matériel défini par

$$T_{\nu}^{\mu} = \Psi\delta_{\nu}^{\mu} + \sum_x \pi_{\nu}^{\text{x}} n_x^{\mu}. \quad (4.241)$$

et le tenseur énergie impulsion du champ gravitationnel

$$T_{\text{grf}\nu}^{\mu} = \left(\frac{1}{8\pi G} g^{\rho} \nabla_{\rho}\phi \right) \delta_{\nu}^{\mu} - \frac{1}{4\pi G} g^{\mu} \nabla_{\nu}\phi. \quad (4.242)$$

4.4.3 Densité d'énergie et de 3-impulsion

La densité de 3-impulsion est définie à partir du tenseur énergie-impulsion comme

$$\Pi^{\mu} \equiv t_{\rho} T_{\nu}^{\rho} \gamma^{\nu\mu}. \quad (4.243)$$

Puisque $g^{\mu} t_{\mu} = 0$, nous avons également $\Pi^{\mu} = t_{\rho} T_{\text{tot}\rho}^{\nu} \gamma^{\nu\mu}$. Le vecteur densité de 3-impulsion s'écrit de façon plus explicite

$$\Pi^{\mu} = \sum_x \pi_{\nu}^{\text{x}} n_x^{\nu\mu}, \quad (4.244)$$

soit encore

$$\Pi^\mu = \sum_x \Pi^{x\mu}, \quad (4.245)$$

avec

$$\Pi^{x\mu} \equiv n_x (m^x v_x^\mu + \chi_\nu^x \gamma^{\mu\nu}). \quad (4.246)$$

Nous voyons donc que la densité de 3-impulsion d'un fluide donnée $\Pi^{x\mu}$ n'est en général pas alignée avec la 3-vitesse correspondante. Néanmoins, cet effet d'entraînement s'annule pour la densité de 3-impulsion *totale*. En effet d'après l'identité de Noether (4.226) pour $\Lambda_a = \Lambda_{\text{int}}$ contractée avec t_μ et $\gamma^{\nu\rho}$, seul subsiste le terme contenant l'impulsion généralisée

$$\sum_x \chi_\nu^x \gamma^{\nu\rho} n_x = 0. \quad (4.247)$$

Cette dernière égalité est une généralisation de la relation (4.170) établie dans le cadre du modèle à deux fluides de Tisza-Landau. Remarquons que pour déduire (4.247), nous avons supposé que la densité lagrangienne Λ_{int} est invariante de jauge, c'est-à-dire indépendante de e^μ . L'identité (4.247) est donc une conséquence du principe de relativité (galiléenne et plus généralement de Milne).

D'après (4.247), la densité de 3-impulsion *totale* est donc simplement égale à la partie spatiale du courant total de masse

$$\Pi^\mu = \sum_x n_x m^x v_x^\mu = \gamma_\nu^\mu \rho^\nu. \quad (4.248)$$

Nous pouvons également déduire une autre relation sur les impulsions chimiques en contractant l'identité de Noether (4.226) avec $\gamma^{\nu\sigma}$ puis en antisymétrisant sur les indices σ et μ

$$\sum_x n_x^{[\mu} \gamma^{\sigma]\nu} \chi_\nu^x = 0. \quad (4.249)$$

En utilisant cette égalité, nous obtenons avec (4.241)

$$\gamma^{\sigma[\nu} T_{\sigma}^{\mu]} = \sum_x m^x e^{[\mu} n_x^{\nu]}, \quad (4.250)$$

donc les composantes spatiales du tenseur énergie-impulsion sont symétriques, qu'elles soient contravariantes

$$\gamma_\nu^\rho \gamma_\mu^\lambda \gamma^{\sigma[\nu} T_{\sigma}^{\mu]} = 0, \quad (4.251)$$

ou covariantes (en contractant par $\gamma^{\rho\delta} \gamma^{\lambda\gamma}$)

$$\gamma^\sigma_{[\delta} \gamma_{\mu]\gamma} T_{\sigma}^{\mu} = 0. \quad (4.252)$$

La densité de courant d'énergie associée à $T_{a\nu}^\mu$ est définie par

$$U_a^\mu \equiv -e^\nu T_{a\nu}^\mu \quad (4.253)$$

dont la composante temporelle $U_a = U_a^\mu t_\mu$ est la densité d'énergie qui est égale à

$$U_a = -t_\mu e^\nu T_{a\nu}^\mu = -\Psi_a - \sum_x \pi_a^x e^\nu n_x. \quad (4.254)$$

La densité d'énergie totale est simplement la somme $U_{\text{tot}} = \sum U_a$. En particulier, cette densité d'énergie comporte une partie purement gravitationnelle donnée par

$$U_{\text{grt}} = U_{\text{pot}} + U_{\text{grf}}, \quad (4.255)$$

$$U_{\text{pot}} = \rho\phi, \quad U_{\text{grf}} = -\frac{1}{2}\rho\phi - \frac{1}{8\pi G}\nabla_\mu(\phi g^\mu). \quad (4.256)$$

A cette contribution à la densité d'énergie totale s'ajoute un densité d'énergie matérielle

$$U_{\text{mat}} = U_{\text{cin}} + U_{\text{int}}, \quad (4.257)$$

$$U_{\text{cin}} = \frac{1}{2}\sum_x \gamma_\nu^\mu n_x^\mu p_\nu^x, \quad U_{\text{int}} = \sum_x n_x \chi^x - \Psi, \quad (4.258)$$

en définissant le potentiel chimique par $\chi^x \equiv -e^\nu \chi_\nu^x$. En rassemblant tous les termes, la densité d'énergie totale est égale à

$$U_{\text{tot}} = -\Psi - \left(\frac{1}{8\pi G} g^\rho \nabla_\rho \phi \right) - \sum_x n_x \pi_\nu^x e^\nu. \quad (4.259)$$

4.5 Symétries et vecteurs de Killing généralisés

Lorsque le fluide et/ou l'espace-temps possède certaines symétries (écoulement stationnaire par exemple), les champs q caractérisant ce fluide (densité, pression, *etc.*) seront invariants par transport de Lie le long de certains vecteurs que nous appellerons générateurs de symétrie notés k_a^μ où l'indice latin est utilisé pour distinguer différents générateurs. Ces vecteurs sont les analogues des vecteurs de Killing en relativité générale¹. Plus précisément, comme le système doit obéir au principe de relativité, cela signifie que la dérivée de Lie de ces quantités q le long des générateurs s'annule, *modulo* une transformation infinitésimale de jauge $\check{d}_a q$, d'où la condition

$$\mathcal{L}_a q + \check{d}_a q = 0, \quad (4.260)$$

en notant $\mathcal{L}_a \equiv \vec{k}_a \mathcal{L}$.

¹ k^μ est un vecteur de Killing si la dérivée de Lie de la métrique, donc du champ de gravitation, est nulle. Comme le champ de gravitation est déterminé par la matière-énergie, ceci traduit bien une symétrie de l'espace-temps.

4.5.1 Transformations infinitésimales de jauge

Une transformation infinitésimale de jauge $q \mapsto \check{d}q$ est définie par la procédure suivante. Tout d'abord, considérons une famille de transformations $q \mapsto q\{\epsilon\}$ dépendant d'un paramètre $0 \leq \epsilon \leq 1$, générées par un potentiel de jauge $\beta\{\epsilon\} = \epsilon\beta$, avec $q\{0\} \equiv q$ et $q\{1\} \equiv \check{q}$. La transformation infinitésimale est alors définie comme

$$\check{d}q = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\epsilon} (q\{\epsilon\}). \quad (4.261)$$

Nous pouvons remarquer que cette transformation ne modifie pas l'ordre d'un tenseur. Les variations infinitésimales des potentiels de jauge (3.57), (3.58) et (4.128), sont particulièrement simples

$$\check{d}\alpha = \alpha, \quad \check{d}\hat{\beta} = \check{d}\beta = \beta, \quad (4.262)$$

de même que celles des vecteurs vitesse et accélération correspondantes

$$\check{d}b^\mu = b^\mu, \quad \check{d}a^\mu = a^\mu. \quad (4.263)$$

En particulier, les potentiels β et $\hat{\beta}$ possèdent la même loi de transformation infinitésimale.

Les transformations infinitésimales coïncident avec leurs homologues finies lorsque ces dernières ne dépendent que linéairement du potentiel de jauge β . C'est notamment le cas des tenseurs suivants

$$\check{d}e^\mu = b^\mu, \quad \check{d}v^\mu = -b^\mu, \quad (4.264)$$

$$\check{d}\gamma_\nu^\mu = -t_\nu b^\mu, \quad \check{d}\Gamma_\mu^\nu{}_\rho = -t_\mu a^\nu t_\rho. \quad (4.265)$$

En revanche, le passage à la limite infinitésimale simplifie les transformations de jauge de la métrique covariante et l'impulsion cinétique puisque seuls sont les termes linéaires subsistent :

$$\check{d}\gamma_{\mu\nu} = -2t_{(\mu}\gamma_{\nu)\rho}b^\rho, \quad \check{d}p_\mu = -m\gamma_{\mu\nu}b^\nu. \quad (4.266)$$

Par suite, la transformation infinitésimale de l'impulsion généralisée est donnée par

$$\check{d}\pi_\mu = -m\nabla_\mu\beta, \quad (4.267)$$

que l'on considère un fluide ou une particule ponctuelle puisque l'énergie interne donnant lieu à la pression dans un fluide ne dépend pas du choix d'un référentiel inertiel. Cette transformation est du même type que celle du potentiel électromagnétique A_μ , même si ces deux transformations sont de nature complètement différentes.

Finalement, la variation infinitésimale de la densité lagrangienne $\Lambda = n^\mu\pi_\mu + P$ est égale à

$$\check{d}\Lambda = -\rho^\nu\nabla_\nu\beta. \quad (4.268)$$

Ce terme de jauge n'aura aucune conséquence sur les équations déduite de la variation de l'action \mathcal{A} s'il s'exprime par une divergence. Nous retrouvons donc ici, que les équations du

fluide obtenues par le principe variationnel ne pourront satisfaire le principe de relativité que dans le cas où la densité de masse du fluide est conservée

$$\nabla_\nu \rho^\nu = 0, \tag{4.269}$$

puisque alors la transformation de la densité lagrangienne est simplement

$$\check{d}\Lambda = -\nabla_\nu(\beta\rho^\nu). \tag{4.270}$$

4.5.2 Propriétés des vecteurs de Killing

Si une symétrie est présente, la structure de l'espace-temps doit être évidemment préservée. Puisque le gradient du temps universel t_μ est indépendant de jauge, la condition (4.260) se réduit simplement à l'annulation de la dérivée de Lie

$$\mathcal{L}_a t_\mu \equiv k_a^\nu \nabla_\nu t_\mu + t_\nu \nabla_\mu k_a^\nu = 0, \tag{4.271}$$

et puisque la dérivée covariante préserve ce tenseur, cette dernière équation se réduit simplement à

$$t_\nu \nabla_\mu k_a^\nu = 0. \tag{4.272}$$

De même, la dérivée de Lie de la métrique contravariante doit s'annuler si k_a^ν est un générateur de symétrie, soit

$$\mathcal{L}_a \gamma^{\mu\nu} \equiv k_a^\sigma \nabla_\sigma \gamma^{\mu\nu} - 2\gamma^{\nu(\sigma} \nabla_\sigma k_a^{\mu)} = 0. \tag{4.273}$$

Or comme la métrique est compatible avec la connexion, $\nabla_\sigma \gamma^{\mu\nu} = 0$, nous avons finalement la condition

$$\gamma^{\rho(\mu} \nabla_\rho k_a^{\nu)} = 0. \tag{4.274}$$

Il est intéressant de réécrire cette dernière condition dans des coordonnées aristotéliennes $\{t, X^i\}$

$$\nabla^{(i} k_a^{j)} = 0. \tag{4.275}$$

Sous cette forme, cette condition ressemble à la relation de définition des vecteurs de Killing en relativité générale, qui s'exprime comme $\mathcal{L}_a g^{\mu\nu} = 0$, où $g^{\mu\nu}$ est la métrique¹ de l'espace-temps, soit $\nabla^{(\mu} k_a^{\nu)} = 0$ puisque dans ce cas nous pouvons monter les indices.

En contractant l'équation (4.272) avec e^μ et en introduisant le projecteur spatial, nous avons

$$\nabla_\nu k_a^\nu - \gamma_\nu^\mu \nabla_\mu k_a^\nu = 0. \tag{4.276}$$

¹au sens mathématique du terme!

Par ailleurs, en contractant l'équation (4.274) par la métrique covariante $\gamma_{\nu\mu}$, nous obtenons

$$\gamma_{\nu}^{\mu}\nabla_{\mu}k_{\text{a}}^{\nu} = 0, \quad (4.277)$$

ce qui implique que les générateurs de symétrie sont de divergence nulle

$$\nabla_{\nu}k_{\text{a}}^{\nu} = 0. \quad (4.278)$$

Le vecteur de Killing k_{a}^{μ} doit également préserver le vecteur d'éther e^{μ} . Ce tenseur n'est pas invariant de jauge, cela signifie que nous avons la condition

$$\mathcal{L}_{\text{a}}e^{\mu} = -\check{\text{d}}_{\text{a}}e^{\mu} \quad (4.279)$$

soit en utilisant la condition $\nabla_{\nu}e^{\mu} = 0$

$$e^{\nu}\nabla_{\nu}k_{\text{a}}^{\mu} = b_{\text{a}}^{\mu}. \quad (4.280)$$

Ceci montre que pour un vecteur de Killing k_{a}^{μ} donné, le vecteur de jauge b_{a}^{μ} associé est unique. En revanche, la réciproque est fautive puisque des vecteurs de Killing qui ne diffèrent que par un terme indépendant du temps correspondent à un même vecteur b_{a}^{μ} . Nous voyons aussi que seuls les vecteurs de Killing qui dépendent du temps t donnent lieu à des transformations de jauge.

Le vecteur accélération correspondant est donné par

$$a_{\text{a}}^{\mu} = e^{\rho}\nabla_{\rho}b_{\text{a}}^{\mu} = e^{\rho}e^{\nu}\nabla_{\rho}\nabla_{\nu}k_{\text{a}}^{\mu}. \quad (4.281)$$

soit

$$\nabla_{\mu}\nabla_{\nu}k_{\text{a}}^{\rho} = t_{\mu}t_{\nu}a^{\rho}. \quad (4.282)$$

Cette dernière égalité est équivalente à la condition que la connexion reste invariante par transport de Lie le long du vecteur de Killing

$$\mathcal{L}_{\text{a}}\Gamma_{\mu\nu}^{\rho} = -\check{\text{d}}_{\text{a}}\Gamma_{\mu\nu}^{\rho} = t_{\mu}t_{\nu}a^{\rho}, \quad (4.283)$$

puisque par la formule de Yano (1955), la dérivée de Lie d'une connexion plate est donnée par

$$\mathcal{L}_{\text{a}}\Gamma_{\mu\nu}^{\rho} = \nabla_{\mu}\nabla_{\nu}k_{\text{a}}^{\rho}. \quad (4.284)$$

La condition que le générateur k_{a}^{μ} laisse invariant le vecteur d'éther garantit que la connexion est aussi préservée. Ceci n'est pas surprenant puisque la connexion est définie de telle sorte que le vecteur d'éther est autotransporté, $e^{\mu}\nabla_{\mu}e^{\nu} = 0$.

Pour finir, nous pouvons exprimer le gradient du vecteur k_{a}^{μ} en séparant, parties spatiale et temporelle en écrivant

$$\nabla_{\mu}k_{\text{a}}^{\nu} = \delta_{\mu}^{\rho}\delta_{\sigma}^{\nu}\nabla_{\rho}k_{\text{a}}^{\sigma}, \quad (4.285)$$

puis en substituant le symbole de Kronecker ¹ par $\delta_\nu^\mu = \gamma_\nu^\mu - e^\mu t_\nu$ dans l'expression précédente, et en utilisant (4.280)

$$\nabla_\mu k_a^\nu = \gamma_\mu^\rho \gamma_\sigma^\nu \nabla_\rho k_a^\sigma - t_\mu \gamma_\sigma^\nu b_a^\sigma. \quad (4.286)$$

4.5.3 Espace-temps de Newton-Cartan et vecteurs de Killing

Un vecteur de Killing de l'espace-temps de Newton-Cartan doit préserver non seulement les tenseurs de structure que sont le gradient du temps universel t_μ , la métrique $\gamma^{\mu\nu}$ et le vecteur d'éther e^μ mais également la connexion de Newton-Cartan, c'est-à-dire que la dérivée de Lie le long de k_a^μ doit simplement s'annuler

$$\mathcal{L}_a \omega_\mu{}^\rho{}_\nu = 0, \quad (4.287)$$

puisque cette connexion est invariante de jauge contrairement à $\Gamma_{\mu\nu}^\rho$. La dérivée de Lie s'obtient par la formule de Yano (1955)

$$\mathcal{L}_a \omega_{\mu\nu}{}^\rho = D_\mu D_\nu k_a^\rho + R_{\sigma\mu\nu}{}^\rho k_a^\sigma. \quad (4.288)$$

En relativité générale, la situation est plus simple puisqu'il suffit de s'assurer que la dérivée de Lie de la métrique $g_{\mu\nu}$ soit nulle, *i.e.* $\mathcal{L}_a g_{\mu\nu} = 0$, pour que k_a^μ soit un vecteur de Killing associé à une certaine symétrie. En introduisant le champ gravitationnel g^μ dans la formule de Yano, et en utilisant le fait que $g^\mu t_\mu = 0$, on aboutit à l'équation

$$t_\mu t_\nu a_a^\rho - t_\nu t_\sigma k_a^\sigma \nabla_\mu g^\rho + t_\mu t_\nu g^\sigma \nabla_\sigma k_a^\rho + R_{\sigma\mu\nu}{}^\rho k_a^\sigma = 0. \quad (4.289)$$

En utilisant l'expression (3.66) du tenseur de courbure, nous obtenons

$$t_\mu t_\nu (a_a^\rho + g^\sigma \nabla_\sigma k_a^\rho - k_a^\sigma \nabla_\sigma g^\rho) = 0, \quad (4.290)$$

soit encore

$$t_\mu t_\nu (a_a^\rho - \mathcal{L}_a g^\rho) = 0. \quad (4.291)$$

Autrement dit la condition d'invariance de la connexion de Newton-Cartan est équivalente à la condition d'invariance du champ gravitationnel et comme celui-ci dépend de la jauge,

$$\mathcal{L}_a g^\rho = -\check{d}_a g^\rho = -a_a^\rho. \quad (4.292)$$

Cette condition peut encore s'exprimer de façon équivalente en fonction du potentiel gravitationnel ϕ par

$$\mathcal{L}_a \phi = -\check{d}_a \phi, \quad (4.293)$$

d'où

$$k_a^\nu \nabla_\nu \phi = -\alpha_a. \quad (4.294)$$

¹Le tenseur δ_ν^μ a les mêmes composantes dans n'importe quel système de coordonnées, c'est pourquoi nous pouvons également parler de symbole.

Dans le cadre de la théorie de Newton, nous voyons ainsi apparaître deux types de vecteurs de Killing, ceux qui préservent seulement la structure de l'espace-temps que nous appellerons *vecteurs de Killing-Milne* et ceux qui en plus préservent le champ gravitationnel que nous distinguerons par *vecteurs de Killing-Cartan*. En relativité générale, cette distinction n'a pas lieu d'être parce que cela n'a pas de sens de séparer le champ gravitationnel de l'espace-temps (le champ gravitationnel s'identifie à la métrique de l'espace-temps). Un vecteur de Killing est alors simplement défini par l'équation $\nabla^{(\mu} k^{\nu)}$.

4.5.4 Vecteurs de Killing et symétries

Considérons l'action successive d'une transformation infinitésimale de jauge \check{d} et de la dérivée de Lie dans un champ vectoriel *quelconque* ξ^μ , sur un objet géométrique q . Nous avons vu précédemment qu'une transformation de jauge se caractérise par un changement du vecteur d'éther $e^\mu \mapsto \check{e}^\mu + b^\mu$. Nous supposons que l'objet q est non seulement un champs, c'est-à-dire une fonction des coordonnées x^μ de l'espace-temps, mais également fonction de la jauge e^μ et nous avons donc explicitement $q = q\{x^\mu, e^\mu\}$. Nous pouvons ainsi réécrire une transformation infinitésimale de jauge (4.261) sous la forme

$$\check{d}q = b^\mu \frac{\partial q}{\partial e^\mu}. \quad (4.295)$$

Ensuite, nous choisissons pour calculer la dérivée de Lie, un système de coordonnées telles que le champ ξ^μ ne possède qu'une seule composante non nulle, par exemple ξ^1 (autrement dit $\vec{\xi} = \partial_1$). Dans ce cas la dérivée de Lie dans le champ ξ^μ se réduit simplement à la dérivée partielle par rapport à la coordonnée x^1 . Donc nous avons

$$\vec{\xi}\mathcal{L}\{\check{d}q\} = \vec{\xi}\mathcal{L}\{b^\mu \frac{\partial q}{\partial e^\mu}\} = \frac{\partial b^\mu}{\partial x^1} \frac{\partial q}{\partial e^\mu} + b^\mu \frac{\partial^2 q}{\partial x^1 \partial e^\mu}. \quad (4.296)$$

De la même façon nous pouvons évaluer l'action successive de la dérivée de Lie suivie d'une transformation de jauge

$$\check{d}\{\vec{\xi}\mathcal{L}q\} = b^\mu \frac{\partial^2 q}{\partial x^1 \partial e^\mu}. \quad (4.297)$$

Ceci montre que le transport de Lie et le changement de jauge ne commutent pas. En particulier, en réintroduisant explicitement la dérivée de Lie nous avons la relation

$$[\vec{\xi}\mathcal{L}, \check{d}]q = \vec{\xi}\mathcal{L}\{\check{d}q\} - \check{d}\{\vec{\xi}\mathcal{L}q\} = \left(\vec{\xi}\mathcal{L}b^\mu\right) \frac{\partial q}{\partial e^\mu}. \quad (4.298)$$

Le commutateur entre les deux opérations est donc un changement de jauge donnée par $e^\mu \mapsto \check{e}^\mu = e^\mu + \vec{\xi}\mathcal{L}b^\mu$. Au contraire, l'action successive de deux transformations de jauge ne dépend pas de l'ordre dans lequel sont effectuées les opérations puisque deux changements de jauge, $e^\mu \mapsto \check{e}^\mu = e^\mu + b_a^\mu$ et $e^\mu \mapsto \check{e}^\mu = e^\mu + b_b^\mu$ sont évidemment équivalents à une autre transformation de jauge donnée par $e^\mu \mapsto \check{e}^\mu = e^\mu + b_a^\mu + b_b^\mu$. Par ailleurs, la propriété

$$[\vec{\xi}_a, \vec{\xi}_b]\mathcal{L}q = \vec{\xi}_a\mathcal{L}\{\vec{\xi}_b\mathcal{L}q\} - \vec{\xi}_b\mathcal{L}\{\vec{\xi}_a\mathcal{L}q\}, \quad (4.299)$$

montre que le commutateur de deux dérivées de Lie successives le long de $\vec{\xi}_a$ et $\vec{\xi}_b$ est une dérivée de Lie le long du commutateur $[\vec{\xi}_a, \vec{\xi}_b]$. Finalement nous avons démontré le théorème suivant :

$$[\vec{\xi}_a \mathcal{L} + \check{d}_a, \vec{\xi}_b \mathcal{L} + \check{d}_b] = \vec{\xi}_c \mathcal{L} + \check{d}_c \quad (4.300)$$

$$\vec{\xi}_c = [\vec{\xi}_a, \vec{\xi}_b] \quad (4.301)$$

$$b_c^\mu = \vec{\xi}_a \mathcal{L} b_b^\mu - \vec{\xi}_b \mathcal{L} b_a^\mu. \quad (4.302)$$

Nous pouvons maintenant appliquer ce théorème en choisissant comme champs ξ_a^μ des vecteurs de Killing k_a^μ avec les transformations de jauge associées. Etant donnés deux vecteurs de Killing, disons k_a^μ et k_b^μ , leur crochet de Lie défini par

$$[k_a, k_b]^\mu = k_a^\nu \nabla_\nu k_b^\mu - k_b^\nu \nabla_\nu k_a^\mu \quad (4.303)$$

est donc aussi un vecteur de Killing. En particulier, la transformation de jauge associée $e^\mu \mapsto \check{e}^\mu + b^\mu$ avec $b^\mu = \vec{k}_a \mathcal{L} b_b^\mu - \vec{k}_b \mathcal{L} b_a^\mu$ vérifie $b^\mu = e^\nu \nabla_\nu [k_a, k_b]^\mu$. Puisque le crochet de Lie est un vecteur de Killing, il doit s'exprimer comme une combinaison linéaire des autres vecteurs de Killing donc l'ensemble $\{k_a^\mu\}$ des vecteurs de Killing forment une algèbre fermée (la sommation sur l'indice c étant implicite)

$$[k_a, k_b]^\mu = C_{ab}^c k_c^\mu. \quad (4.304)$$

De plus comme le crochet vérifie l'identité de Jacobi

$$[\vec{k}_a, [\vec{k}_b, \vec{k}_c]] + [\vec{k}_c, [\vec{k}_a, \vec{k}_b]] + [\vec{k}_b, [\vec{k}_c, \vec{k}_a]] = 0 \quad (4.305)$$

nous pouvons en conclure par le théorème de Lie que l'algèbre engendrée par les vecteurs de Killing est une algèbre de Lie. Avec un choix approprié de normalisation, ces vecteurs de Killing sont donc proportionnels aux générateurs d'un groupe de Lie. En particulier, le nombre de vecteurs de Killing est égal au nombre de générateurs du groupe de Lie correspondant. Les nombres C_{ab}^c sont appelés les constantes de structure du groupe de Lie. Ce groupe de Lie est par définition isomorphe au groupe de symétrie du système, formé par l'ensemble des transformations qui laissent le système invariant (il est facile de se convaincre que cet ensemble est bien un groupe, avec pour élément neutre la transformation identique). Inversement, connaissant les symétries du système, par exemple l'invariance par translation, nous pouvons en déduire les vecteurs de Killing comme les générateurs du groupe de Lie correspondant. Nous avons ainsi établi le lien entre les vecteurs de Killing et les symétries du système. Nous allons maintenant étudier plus en détails sur des exemples certaines de ces symétries.

4.5.5 Application : cosmologie de Milne

Nous allons considérer des modèles cosmologiques dans le cadre de l'espace-temps de Newton-Cartan. Le modèle d'univers proposé par Edward Arthur Milne (voir Milne (1934), McCrea & Milne (1934)) est un univers homogène isotrope mais *non stationnaire*.

Autrement dit cet univers est en expansion avec une constante de Hubble $H = \dot{\sigma}/\sigma$ qui varie éventuellement d'une époque à une autre. La seule force présente est la force gravitationnelle dont le potentiel est donné par (à des termes linéaires près)

$$\phi = \frac{2}{3}\pi G\rho\gamma_{ij}X^iX^j. \quad (4.306)$$

Nous voyons sur cet exemple que le champ gravitationnel g^μ déduit du potentiel (4.306) n'est pas physique puisqu'à première vue il varie d'un point à l'autre de l'univers, en contradiction avec nos hypothèses. Ce paradoxe apparent est levé en calculant le tenseur de courbure (3.66)

$$R_{\mu\nu}{}^\lambda{}_\sigma = \frac{8}{3}\pi G\rho t_{[\nu}t_{\mu]}^\lambda, \quad (4.307)$$

qui est explicitement homogène et isotrope.

L'isotropie de l'espace se traduit par l'existence de trois vecteurs de Killing k_j^μ avec $j = 1, 2, 3$ correspondant aux trois générateurs du groupe des rotations spatiales $SO(3)$ ¹ dont l'algèbre de Lie est donnée par

$$[\vec{k}_{j_1}, \vec{k}_{j_2}] = -\varepsilon_{j_1j_2}{}^{j_3}\vec{k}_{j_3}. \quad (4.308)$$

Nous avons multiplié les générateurs du groupe de Lie par $i = \sqrt{-1}$ pour définir les vecteurs de Killing de façon à ne pas introduire inutilement des nombres complexes (la normalisation des vecteurs de Killing étant arbitraire). Le générateur \vec{k}_j est associé à une rotation spatiale autour d'un axe spécifié par un vecteur unitaire $\nu_j^i = \delta_j^i$. Les vecteurs de Killing sont donc définis par²

$$k_j^0 = 0, \quad k_j^i = Y_k^i \nu_j^k, \quad (4.309)$$

où Y_{ij} est la 2-forme de Yano qui satisfait l'équation

$$\nabla_{(i}Y_{j)k} = 0, \quad (4.310)$$

et dont les composantes en coordonnées cartésiennes sont égales à

$$Y_{ij} = \varepsilon_{ijk}X^k. \quad (4.311)$$

Ces vecteurs de Killing sont tous indépendants du temps et par conséquent il n'est pas nécessaire de considérer des transformations de jauge ($b_j^\mu = 0$). Il est facile de vérifier que ces vecteurs de Killing préservent les tenseurs de structure de l'espace-temps newtonien (sans ajustement de jauge) et peuvent donc être qualifiés de vecteurs de Killing-Milne. Puisque de plus, le potentiel gravitationnel est à symétrie sphérique les vecteurs k_j^μ sont des vecteurs de Killing-Cartan (nous pouvons directement vérifier que $\vec{k}_j \mathcal{L}\phi = k_j^\nu \nabla_\nu \phi = 0$).

¹Le groupe $SO(3)$ est le groupe des matrices 3×3 orthogonales, de déterminant 1.

²Nous pouvons remarquer que les vecteurs de Killing sont proportionnels aux opérateurs de moments cinétiques en mécanique quantique. Ceci n'est pas surprenant puisque les vecteurs dans une variété sont aussi définis par des opérateurs.

L'invariance par translation (spatiale) est caractérisée par trois vecteurs de Killing que nous distinguerons des précédents en les notant k_{-j}^μ , qui s'écrivent dans des coordonnées aristotéliennes ¹

$$k_{-j}^0 = 0, \quad k_{-j}^i = \sigma \delta_j^i. \quad (4.312)$$

La découverte de Milne a été de montrer qu'une telle symétrie dans laquelle σ dépend du temps, était associée à une transformation de jauge donnée par

$$b_{-j}^i = \dot{k}_{-j}^i = \dot{\sigma} \delta_j^i, \quad \beta_{-j} = \dot{\sigma} \gamma_{ji} X^i. \quad (4.313)$$

En particulier, le champ des vitesses satisfait $\mathcal{L}_{-j} v^i = b_{-j}^i$, tandis que la condition qui qualifie k_{-j}^μ comme des vecteurs de Killing-Cartan, s'écrit

$$\mathcal{L}_{-j} g^i = a_{-j}^i, \quad \mathcal{L}_{-j} \phi = -\alpha_{-j}, \quad (4.314)$$

avec

$$a_{-j}^i = \ddot{\sigma} \delta_j^i, \quad \alpha_{-j} = \ddot{\sigma} \gamma_{ji} X^i. \quad (4.315)$$

4.5.6 Lois de conservation et courants d'impulsions généralisées

A partir de ces vecteurs de Killing k_a^μ , nous pouvons construire des courants d'impulsion

$$\mathcal{P}_a^\mu = T^\mu_\nu k_a^\nu. \quad (4.316)$$

Par exemple, \mathcal{P}_1^μ s'interprète comme un courant de moment cinétique (autour de l'axe X^1 dans les coordonnées aristotéliennes correspondantes). \mathcal{P}_{-1}^μ est associé à un transport d'impulsion dans un référentiel en comouvement avec l'expansion (le long de l'axe X^1). Celui-ci se réduit à une impulsion ordinaire en l'absence d'expansion, c'est-à-dire lorsque le facteur σ dans l'équation (4.312) est indépendant du temps.

En remarquant que le tenseur $T^\mu_\nu \gamma_\mu^\rho \gamma_\sigma^\nu \nabla_\rho k_a^\sigma = T^\mu_\nu \gamma_{\mu\lambda} \gamma_\sigma^\nu \gamma^{\rho\lambda} \nabla_\rho k_a^\sigma$, est nul par les relations de symétrie (4.274) et (4.252), et en utilisant la décomposition (4.286), nous obtenons finalement

$$T^\mu_\nu \nabla_\mu k_a^\nu = T^\mu_\nu t_\mu b_a^\nu, \quad (4.317)$$

où $b_a^\mu = \gamma^{\mu\nu} \nabla_\nu \beta_a$. La divergence des courants d'impulsion \mathcal{P}_a^μ s'exprime comme

$$\nabla_\nu \mathcal{P}_a^\nu = k_a^\nu (f_\nu - \rho \nabla_\nu \phi) + \Pi^\nu \nabla_\nu \beta_a, \quad (4.318)$$

en utilisant la relation $\nabla_\mu T^\mu_\nu = f_\nu - \rho \nabla_\nu \phi$. En supposant que les forces extérieures sont nulles $f_\nu = 0$ et que le courant de masse est conservé $\nabla_\nu \rho^\nu = 0$, la relation (chap.hydro.eq.379) peut se mettre sous la forme

$$\nabla_\nu (\mathcal{P}_a^\nu - \beta_a \rho^\nu) = -\rho (\alpha_a + k_a^\nu \nabla_\nu \phi). \quad (4.319)$$

¹En mécanique quantique, les générateurs du groupe des translations sont les opérateurs impulsions $-i\hbar \nabla$.

Le tenseur $\mathcal{P}_a^\nu - \beta_a \rho^\nu$ sera donc de divergence nulle si k_a^μ est un vecteur de Killing-Cartan d'après la condition (4.294).

Nous pouvons également introduire un courant d'impulsion total par

$$\mathcal{P}_{\text{tot}}^\mu = T_{\text{tot}}^\mu k_a^\nu = \mathcal{P}_a^\mu + T_{\text{grf}}^\mu k_a^\nu, \quad (4.320)$$

dont la divergence dans le cas d'un système tel que $f_\nu = 0$ et $\nabla_\nu \rho^\nu = 0$, est donnée par

$$\nabla_\nu (\mathcal{P}_{\text{tot}}^\nu - \beta_a \rho^\nu) = -\rho \alpha_a. \quad (4.321)$$

En utilisant l'équation de Poisson (3.54) et l'identité $\alpha_a \nabla_\nu g^\nu = \nabla_\nu (\alpha_a g^\mu + \phi a_a^\nu)$ nous obtenons une loi de conservation avec pour seule condition que k_a^μ soit un vecteur de Killing-Milne,

$$\nabla_\nu \mathcal{P}_{\text{aug}}^\nu = 0, \quad (4.322)$$

avec

$$\mathcal{P}_{\text{aug}}^\nu = \mathcal{P}_{\text{tot}}^\nu - \beta_a \rho^\nu - (4\pi G)^{-1} (\alpha_a g^\mu + \phi a_a^\nu). \quad (4.323)$$

Soulignons encore une fois que la présence des termes de jauge dans le courant d'impulsion généralisé $\mathcal{P}_{\text{aug}}^\mu$ est seulement nécessaire lorsque le vecteur de Killing correspondant dépend du temps, comme par exemple dans le cas des modèles cosmologiques de Milne. Nous avons obtenu la loi de conservation (4.322) à partir des seules symétries de l'espace-temps. Cette loi est donc très générale puisqu'elle reste valide quelles que soient les symétries du fluide.

4.5.7 Théorème de Bernoulli généralisé

Jusqu'à présent, nous nous sommes restreints à des symétries liées à la structure de l'espace-temps de Newton et de Newton-Cartan. Nous allons désormais aborder les symétries du milieu matériel. Dans le cas d'un mélange de fluides, la condition que k_a^μ soit un générateur de symétrie est que l'impulsion généralisée reste invariante par transport de Lie le long de k_a^μ , modulo un terme de jauge

$$\mathcal{L}_a \pi_\nu^x = m^x \nabla_\nu \beta_a. \quad (4.324)$$

En utilisant la formule de Cartan pour la dérivée de Lie,

$$\mathcal{L}_a \pi_\mu^x = 2k_a^\nu \nabla_{[\nu} \pi_{\mu]}^x + \nabla_\mu (k_a^\nu \pi_\nu^x), \quad (4.325)$$

la condition (4.260) sur le générateur de symétrie peut s'écrire

$$\varpi_{\mu\nu}^x k_a^\nu = \nabla_\mu \mathcal{B}_a^x, \quad (4.326)$$

où \mathcal{B}_a^x la composante de l'impulsion le long de k_a^μ ajustée d'un terme de jauge

$$\mathcal{B}_a^x = k_a^\nu \pi_\nu^x - m^x \beta_a. \quad (4.327)$$

Dans le cas où l'écoulement d'une composante fluide est irrotationnel, ce scalaire \mathcal{B}_a^x est une constante

$$\varpi_{\mu\nu}^x = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla_\nu \mathcal{B}_a^x = 0. \quad (4.328)$$

Lorsque l'écoulement est de plus stationnaire, le générateur de symétrie associé est simplement $k_0^\mu \equiv e^\mu$ et la loi de conservation de

$$\mathcal{B}_0^x = \pi_\nu^x e^\nu = - \left(\frac{1}{2} m^x v_x^2 + m^x \phi - \chi^x \right) \quad (4.329)$$

s'identifie alors au théorème de Daniel Bernouilli¹. Pour un milieu invariant par rotation autour d'un axe X^1 , c'est le moment cinétique effectif par particule $\mathcal{B}_1^x = \pi_\nu^x k_1^\nu$, qui sera constant. L'interprétation de $\mathcal{B}_{-1}^x = k_{-1}^\nu \pi_\nu^x - m^x \beta_{-1}$, associé à l'invariance par une translation accélérée le long de l'axe X^1 est moins évidente.

Dans le cas plus général d'un fluide soumis à une densité de force f_ν^x , dont l'écoulement n'est pas irrotationnel et en supposant un transfert de particules $\mathcal{D}_x = -\nabla_\nu n_x^\nu$ nous avons

$$n_x^\nu \nabla_\nu \mathcal{B}_a^x = k_a^\nu f_\nu^x + k_a^\nu \pi_\nu^x \mathcal{D}_x. \quad (4.330)$$

Nous pouvons alors en conclure que le scalaire de Bernouilli \mathcal{B}_a^x est constant le long des lignes de courant lorsque le fluide est isolé et le courant conservé

$$f_\nu^x = 0, \quad \mathcal{D}_x = 0 \quad \Rightarrow \quad n_x^\nu \nabla_\nu \mathcal{B}_a^x = 0. \quad (4.331)$$

Il est possible de reformuler le théorème de Bernouilli en terme de densité de courant d'impulsion

$$\mathcal{P}_a^{x\mu} = \mathcal{B}_a^x n_x^\mu. \quad (4.332)$$

En particulier, l'équation (4.330) peut s'exprimer comme

$$\nabla_\nu \mathcal{P}_a^{x\nu} = k_a^\nu f_\nu^x + \beta_a m^x \mathcal{D}_x. \quad (4.333)$$

Cette densité de courant d'impulsion est reliée au courant (4.316) introduit précédemment par

$$\mathcal{P}_a^\mu - \beta_a \rho^\mu = \sum_x \mathcal{P}_a^{x\mu} + \Psi k_a^\mu. \quad (4.334)$$

Nous avons vu dans la section précédente que le terme de gauche est conservé dans le cas où le système est isolé $f_\nu = 0$ et que k_a^μ est un vecteur de Killing-Cartan, autrement dit que le champ de gravitation possède la symétrie en question. Ce que nous avons montré dans cette section est que $\nabla_\nu \mathcal{P}_a^{x\nu} = 0$ lorsque le fluide est lui-même invariant et que chaque fluide est isolé $f_\nu^x = 0$ et que son courant est conservé $\mathcal{D}_x = 0$. Par suite, $\nabla_\nu (\Psi k_a^\nu) = 0$ donc chaque terme dans le membre de droite est *séparément* conservé.

¹En réalité, c'est Louis Lagrange qui a démontré ce théorème sous cette forme en intégrant l'équation d'Euler (voir Tokaty (1994)).

FIGURE 4.7 – Anton Flettner (1885-1961) et son *rotorship* construit en 1924

4.5.8 Problème de Iordanskii

En 1794, l'Académie des Sciences de Berlin offre un prix à celui qui parviendra à expliquer la déviation des projectiles de leur trajectoire attendue. La réponse ne sera apportée que 58 ans plus tard par Gustav Heinrich Magnus, professeur de physique à l'université de Berlin. Il montra expérimentalement qu'un cylindre en rotation dans une soufflerie subissait une déviation perpendiculaire à la direction du vent. Cet effet Magnus avait néanmoins été déjà expliqué par Benjamin Robins à Londres dans un ouvrage remarqué publié en 1742 et complété ensuite par Euler. Ces résultats furent exposés à la *Royal Society* en 1749, soit un peu plus d'un siècle avant Magnus. Ce n'est qu'au début du XX^{ème} siècle que le professeur russe Nikolai Egorovich Zhukovskiy (aussi orthographié Joukowski) démontra la forme explicite de cette force (la portance) dans le cas d'une aile d'avion obtenue par déformation conforme d'un cylindre, dans un fluide parfait de densité n en écoulement uniforme à la vitesse u . Cette force par unité de longueur (dans la direction du cylindre supposé infini) est donnée par la formule $\mathcal{F} = nu\mathcal{C}$, où \mathcal{C} est la circulation autour de l'aile. Joukowski donna également une prescription pour déterminer cette circulation. Anton Flettner, ingénieur Allemand, s'est rendu célèbre en construisant un bateau propulsé par l'effet Magnus, dans les années 1920. Le commandant Cousteau reprit cette idée dans les années 1980.

Théorème de Kutta-Joukowski généralisé

Nous allons généraliser le théorème de Kutta-Joukowski (voir Landau & Lifshitz (1989)) dans le cas d'un mélange de fluides parfaits. Cette question a été soulevée notamment dans le cadre du modèle à deux fluides de l'hélium 4 superfluide (pour la généralisation relativiste, voir Carter *et al.* (2002)). Calculons la force qui s'exerce sur un tourbillon d'extension infinie dans un milieu *asymptotiquement uniforme* caractérisé par des courants \bar{n}_x^ν (toutes les valeurs asymptotiques seront dénotées par une barre). Nous faisons l'hypothèse que le champ de gravitation n'est pas perturbé par la présence du tourbillon. L'écoulement est supposé stationnaire, et invariant par translation le long de l'axe du tourbillon. Le système admet donc deux vecteurs de Killing : le vecteur d'éther e^μ et un vecteur purement spatial l^μ unitaire ($l^\mu t_\mu = 0$ et $\gamma_{\mu\nu} l^\mu l^\nu = 1$) le long de l'axe



FIGURE 4.8 – Turbovoile conçue par l'équipe du commandant Cousteau

du tourbillon. Chaque fluide est isolé $f_\nu^x = 0$ et son courant est conservé $\nabla_\nu n_x^\nu = 0$. De plus, l'écoulement est supposé irrotationnel $\varpi^{x\nu\mu} = 0$. Si cette condition est satisfaite initialement, elle le sera également à n'importe quel instant en conséquence de l'équation d'Euler $n_x^\nu \varpi^{x\nu\mu} = 0$. Les scalaires de Bernoulli associés aux vecteurs de Killing sont donc constants $\nabla_\nu \mathcal{B}_a^x = 0$. En particulier, nous avons deux constantes :

$$\mathcal{B}_0^x = \pi_\nu^x e^\nu = \bar{\pi}_\nu^x e^\nu, \quad \mathcal{B}_{-1}^x = \pi_\nu^x l^\nu = \bar{\pi}_\nu^x l^\nu. \quad (4.335)$$

Le mélange de fluides exerce une force sur le tourbillon dans un plan orthogonal à l'axe du tourbillon. Une force s'exprime comme le flux du tenseur énergie-impulsion à travers une surface. En particulier, la force par unité de longueur est donnée par l'intégrale le long d'un contour fermé entourant le tourbillon

$$\mathcal{F}_\nu = \oint \nu_\sigma T_{\text{tot}\nu}^\sigma ds, \quad (4.336)$$

où ds est l'élément de longueur infinitésimale le long du contour, et ν_σ est un covecteur unitaire défini par

$$\nu_\sigma ds \equiv^* \varepsilon_{\sigma\nu} dx^\nu, \quad (4.337)$$

qui est orthogonal à l'axe l^μ et au déplacement infinitésimal dx^ν le long du contour, avec la mesure de surface

$$^* \varepsilon_{\mu\nu} = \varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} e^\sigma l^\rho. \quad (4.338)$$

Le tenseur $\nu_\sigma T_{\text{tot}\nu}^\sigma$ représente la densité surfacique de force.

La conservation du tenseur énergie-impulsion $\nabla_\sigma T_{\text{tot}\nu}^\sigma = 0$ implique que l'intégrale dans (4.336) peut être calculée le long de *n'importe* quel contour entourant le tourbillon. Nous pouvons donc choisir un contour suffisamment éloigné du tourbillon pour qu'un développement linéaire soit valide

$$T_{\text{tot}\nu}^\sigma = \bar{T}_{\text{tot}\nu}^\sigma + \delta T_{\text{tot}\nu}^\sigma + O(\delta^2). \quad (4.339)$$

Par définition, la force est nulle dans le milieu uniforme non perturbé par le tourbillon donc

$$\mathcal{F}_\nu = \delta\mathcal{F}_\nu + O(\delta^2). \quad (4.340)$$

Le développement du tenseur énergie-impulsion au premier ordre conduit à

$$\delta T_{\text{tot}\nu}^\sigma = \sum_x (\bar{\pi}_\nu^x \delta n_x^\sigma + \bar{n}_x^\sigma \delta \pi_\nu^x + \delta \Psi \delta_\nu^\sigma). \quad (4.341)$$

Puisque le champ gravitationnel n'est pas affecté par la présence du tourbillon, par hypothèse, la variation de la contribution correspondante au tenseur énergie-impulsion est nulle $\delta T_{\text{grf}\nu}^\sigma = 0$. La pression généralisée est définie par $\Psi = \Lambda - \sum_x \pi_\nu^x n_x^\nu$, où $\Lambda = \Lambda_{\text{mat}} + \Lambda_{\text{pot}}$. La variation de la pression est égale à

$$\delta \Psi = - \sum_x \bar{n}_x^\nu \delta \pi_\nu^x \quad (4.342)$$

où nous avons utilisé $\delta\phi = 0$. Finalement le tenseur énergie-impulsion s'exprime comme

$$\delta T_{\text{tot}\nu}^\sigma = \sum_x (\bar{\pi}_\nu^x \delta n_x^\sigma + \bar{n}_x^\sigma \delta \pi_\nu^x - \bar{n}_x^\rho \delta \pi_\rho^x \delta_\nu^\sigma). \quad (4.343)$$

La force par unité de longueur est donnée au premier ordre par $\delta\mathcal{F}_\nu = \oint \delta T_{\text{tot}\nu}^\sigma \star \varepsilon_{\sigma\mu} dx^\mu$, c'est-à-dire

$$\delta\mathcal{F}_\nu = \sum_x \left(\bar{\pi}_\nu^x \oint \delta n_x^\sigma \star \varepsilon_{\sigma\mu} dx^\mu + 2\bar{n}_x^\sigma \oint \delta \pi_\nu^x \star \varepsilon_{\sigma\mu} dx^\mu \right). \quad (4.344)$$

Par les lois de conservation de Bernoulli (4.335), les composantes, temporelle et le long de l'axe du tourbillon, de l'impulsion généralisée sont inchangées $e^\nu \delta \pi_\nu^x = 0$ et $l^\nu \delta \pi_\nu^x = 0$ donc $\eta_\nu^\sigma \delta \pi_\nu^x = 0$ où η_ν^σ est le projecteur parallèle au tourbillon défini par¹

$$\eta_\nu^\sigma \equiv e^\sigma t_\nu + l^\sigma l_\nu. \quad (4.345)$$

Nous pouvons directement vérifier que $\eta_\nu^\sigma e^\nu = e^\sigma$ et $\eta_\nu^\sigma l^\nu = l^\sigma$ ($l_\nu l^\nu = 1$). En décomposant le tenseur de Kronecker en $\delta_\nu^\mu = \eta_\nu^\mu + \perp_\nu^\mu$, nous avons la propriété que

$$\perp_\nu^\sigma \delta \pi_\sigma^x = \delta \pi_\nu^x. \quad (4.346)$$

Le projecteur orthogonal au tourbillon est égal à

$$\perp_\nu^\sigma \equiv \delta_\nu^\sigma - \eta_\nu^\sigma = \star \varepsilon^{\mu\sigma} \star \varepsilon_{\mu\nu}, \quad (4.347)$$

où la mesure contravariante de surface est définie par

$$\star \varepsilon^{\mu\nu} \equiv \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} t_\sigma l_\rho, \quad (4.348)$$

¹Puisque l^μ est purement spatial, nous pouvons descendre l'indice $l_\mu = \gamma_{\mu\nu} l^\nu$ sans effet de projection.

dont la normalisation est

$${}^* \varepsilon^{\mu\nu} {}^* \varepsilon_{\mu\nu} = -2. \quad (4.349)$$

La force par unité de longueur peut s'écrire, en introduisant le projecteur orthogonal (4.347),

$$\delta \mathcal{F}_\nu = \sum_x \left(\bar{\pi}_\nu^x \oint \delta n_x^\sigma {}^* \varepsilon_{\sigma\mu} dx^\mu + 2 \bar{n}_x^\sigma \oint \delta \pi_\rho^x \perp_{[\nu}^\rho {}^* \varepsilon_{\sigma]\mu} dx^\mu \right). \quad (4.350)$$

En utilisant l'identité

$$\perp_{[\nu}^\rho {}^* \varepsilon_{\sigma]\mu} = -{}^* \varepsilon_{\nu\sigma} \perp_{\mu}^\rho, \quad (4.351)$$

la force (4.336) se réduit finalement à l'expression

$$\delta \mathcal{F}_\nu = \sum_x \left(\bar{\pi}_\nu^x \delta \mathcal{D}_x + \bar{n}_x^\sigma {}^* \varepsilon_{\sigma\nu} \delta \mathcal{C}^x \right), \quad (4.352)$$

dans laquelle \mathcal{C}^x et \mathcal{D}_x sont respectivement la circulation de l'impulsion et le flux de courant définis par

$$\mathcal{D}_x \equiv \oint n_x^\sigma {}^* \varepsilon_{\sigma\mu} dx^\mu \quad (4.353)$$

$$\mathcal{C}^x \equiv \oint \pi_\nu^x dx^\nu. \quad (4.354)$$

Comme la vorticit  est nulle $\varpi_{\mu\nu}^x \equiv 2 \nabla_{[\mu} \pi_{\nu]}^x = 0$ et que le courant est conserv  $\nabla_\nu n_x^\nu = 0$, les int grales sont ind pendantes du contour. Nous pouvons donc les  valuer le long d'un contour situ    une distance suffisamment grande du tourbillon pour que le d veloppement lin aire de la force soit exact. En supposant, que le coeur du tourbillon n'est pas une source de courant, alors $\mathcal{D}_x = 0$ et puisque les valeurs asymptotiques de ces deux int grales sont nulles, la force s'exer ant sur le tourbillon est finalement donn e par la formule

$$\mathcal{F}_\nu = {}^* \varepsilon_{\sigma\nu} \sum_x \mathcal{C}^x \bar{n}_x^\sigma. \quad (4.355)$$

4.6 Th or me du viriel

Dans cette section, nous allons  tablir des relations et des lois de conservation pour le syst me *global* en supposant que celui-ci soit confin  dans une r gion de l'espace, tels qu'une  toile par exemple. Nous emploierons pour cela une d composition 3+1 traditionnelle de l'espace-temps, avec des coordonn es aristot liciennes $\{X^0 = t, X^i\}$.

L' nergie totale du syst me s'exprime comme l'int grale dans tout l'espace de la densit  d' nergie totale $U_{\text{tot}} = -T_{\text{tot}0}^0$

$$E_{\text{tot}} = \int U_{\text{tot}} d^3X. \quad (4.356)$$

La conservation de la densit  d' nergie totale, qui peut s' crire sous la forme

$$\nabla_0 U_{\text{tot}} = \nabla_i T_{\text{tot}0}^i, \quad (4.357)$$

implique, par le théorème de Green, que l'énergie totale est conservée pour un système isolé

$$\frac{d}{dt}E_{\text{tot}} = \int \nabla_i T_{\text{tot}0}^i d^3X = 0, \quad (4.358)$$

puisque le seul champ de longue portée est le champ gravitationnel $g^\mu = -\gamma^{\mu\nu}\nabla_\nu\phi$ qui décroît comme l'inverse du carré de la distance à la distribution de masse, et donc la contribution correspondante au tenseur énergie-impulsion varie avec l'inverse de la puissance quatrième de la distance.

La conservation (locale) de la densité de 3-impulsion $\Pi^i = \gamma^{ik}T_{\text{tot}k}^0 = T_{\text{tot}}^{0i}$ s'obtient à partir de la conservation du tenseur énergie-impulsion

$$\nabla_0 \Pi^i = -\nabla_j T_{\text{tot}}^{ji} = -\gamma^{ik}\nabla_j T_{\text{tot}k}^j. \quad (4.359)$$

Cette relation permet de déduire une équation pour la densité de masse $\rho = \rho^0$, en remarquant que $\rho^i = \Pi^i$. En effet, en dérivant la loi de conservation du courant de masse

$$\nabla_0 \rho = -\nabla_i \rho^i = -\nabla_i \Pi^i, \quad (4.360)$$

par rapport au temps, nous obtenons une équation différentielle du deuxième ordre qui est à l'origine du théorème du viriel

$$\nabla_0 \nabla_0 \rho = \nabla_i \nabla_j T_{\text{tot}}^{ij}. \quad (4.361)$$

Plus spécifiquement, les différentes formulations du théorème du viriel reposent sur des relations entre des moments de masse

$$\mathcal{M} = \int \rho \mathcal{X} d^3X \quad (4.362)$$

et des moments d'impulsion

$$\mathcal{J} = \int \Pi^i \mathcal{Y}_i d^3X \quad (4.363)$$

dans lesquelles \mathcal{X} and \mathcal{Y}_i sont des fonctions *des coordonnées spatiales uniquement*. Nous avons donc immédiatement que la dérivée temporelle du moment de masse pour un système confiné, est donnée par

$$\frac{d}{dt}\mathcal{M} = -\int \mathcal{X} \nabla_i \Pi^i d^3X = \int \Pi^i \nabla_i \mathcal{X} d^3X, \quad (4.364)$$

où nous avons intégré par partie avec le théorème de Green. Nous avons de la même façon pour le moment d'impulsion

$$\frac{d}{dt}\mathcal{J} = -\int \mathcal{Y}_j \nabla_i T_{\text{tot}}^{ij} d^3X = \int T_{\text{tot}}^{ij} \nabla_i \mathcal{Y}_j d^3X. \quad (4.365)$$

Dans ce dernier cas, du fait de la présence du tenseur énergie-impulsion qui renferme un terme dépendant du champ gravitationnel, le covecteur \mathcal{Y}_j doit satisfaire certaines conditions. Notamment, puisque le tenseur énergie-impulsion du champ gravitationnel décroît

comme l'inverse de la puissance quatrième de la distance, le covecteur \mathcal{Y}_j peut varier au plus comme le carré de la distance. En posant $\mathcal{Y}_i = \nabla_i \mathcal{X}$ et que les conditions précédentes sont satisfaites, nous obtenons la relation générale

$$\frac{d^2}{dt^2} \mathcal{M} = \int T_{\text{tot}}^{ij} \nabla_i \nabla_j \mathcal{X} d^3X. \quad (4.366)$$

Dans le cas de configurations stationnaires, nous obtenons ainsi des intégrales du mouvement.

Nous pouvons appliquer directement les relations précédentes pour la masse totale du système avec les substitutions suivantes :

$$\mathcal{X} \mapsto 1 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{M} \mapsto M, \quad \nabla_i \mathcal{X} \mapsto 0, \quad (4.367)$$

qui est évidemment conservée

$$M = \int \rho d^3X, \quad \frac{d}{dt} M = 0. \quad (4.368)$$

Une autre application directe est celle du moment dipolaire de masse \mathcal{D}^3 le long de l'axe X^3

$$\mathcal{X} \mapsto X^3 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{M} \mapsto \mathcal{D}^3, \quad \nabla_i \mathcal{X} \mapsto \gamma_i^3, \quad \nabla_i \nabla_j \mathcal{X} \mapsto 0. \quad (4.369)$$

Nous avons dans ce cas

$$\mathcal{D}^3 = \int \rho X^3 d^3X, \quad \frac{d}{dt} \mathcal{D}^3 = \int \Pi^3 d^3X, \quad (4.370)$$

où la dernière intégrale représente la composante de la 3-impulsion totale du système dans la direction de l'axe X^3 dont nous pouvons voir qu'elle est conservée

$$\frac{d^2}{dt^2} \mathcal{D}^3 = 0. \quad (4.371)$$

Nous pouvons déduire une autre loi de conservation moins évidente en remplaçant le covecteur \mathcal{Y}_j par les composantes de la 2-forme de Yano. Par exemple, la composante J_3 du moment cinétique total du système le long de l'axe X^3 est donnée par une intégrale de type \mathcal{J} avec les ajustements suivants :

$$\mathcal{Y}_i \mapsto Y_{i3} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{J} \mapsto J_3, \quad \nabla_i \mathcal{Y}_j \mapsto \varepsilon_{ij3}, \quad (4.372)$$

où $Y_{i3} = \varepsilon_{i3k} X^k$. Nous obtenons ainsi que cette composante (et de manière analogue les autres composantes) du moment cinétique est conservée

$$J_3 = \varepsilon_{ij3} \int X^i \Pi^j d^3X, \quad \frac{d}{dt} J_3 = 0, \quad (4.373)$$

où la dernière égalité résulte de la symétrie du tenseur énergie-impulsion $T_{\text{tot}}^{[ij]} = 0$. Nous aurions pu obtenir ce résultat directement à partir de la loi de conservation des courants d'impulsion introduits précédemment.

Nous allons maintenant établir des relations du type théorème du viriel, pour lesquelles \mathcal{X} est une fonction quadratique des coordonnées Cartésiennes X^i . Par exemple, le moment d'inertie I_3 par rapport à un axe, l'axe X^3 disons, s'obtient en posant pour la distance à l'axe $\varpi^2 = (\gamma_{ij} - \delta_i^3 \delta_j^3) X^i X^j = (X^1)^2 + (X^2)^2$

$$I_3 = \int \rho \varpi^2 d^3X, \quad (4.374)$$

d'où la relation

$$\frac{d^2}{dt^2} I_3 = 2 \int (T_{\text{tot}}^{11} + T_{\text{tot}}^{22}) d^3X. \quad (4.375)$$

Comme autre exemple, le moment quadrupolaire de masse, qui est une quantité importante en relativité générale puisqu'elle est associée à l'émission d'ondes gravitationnelles dans la limite post-newtonienne (faibles vitesses et faible champ de gravitation), est défini en posant $\mathcal{X} = X^i X^j$

$$Q^{ij} = \int \rho X^i X^j d^3X, \quad (4.376)$$

dont la dérivée temporelle est donnée par

$$\frac{d}{dt} Q^{ij} = - \int X^i X^j \nabla_i \Pi^{(i} d^3X = 2 \int \Pi^{(i} X^{j)} d^3X, \quad (4.377)$$

et la dérivée seconde par rapport au temps

$$\frac{d^2}{dt^2} Q^{ij} = 2 \int T_{\text{tot}}^{ij} d^3X, \quad (4.378)$$

en utilisant le théorème de Green dans les deux cas et en supposant que la distribution de matière est localisée dans une région finie de l'espace. En particulier, en contractant les indices i et j , nous obtenons l'équation

$$\frac{d^2}{dt^2} Q = 2 \int T_{\text{tot}}^i{}_i d^3X, \quad (4.379)$$

pour le moment quadrupolaire de masse Q par rapport à un point (le centre de masse par exemple)

$$Q = \int \rho r^2 d^3X, \quad (4.380)$$

où $r^2 = \gamma_{ij} X^i X^j$.

Nous pouvons exprimer la relation (4.379) sous une forme plus explicite, en développant le tenseur-énergie impulsion (4.240) et en séparant les différentes contributions. Tout d'abord, l'énergie totale du système se décompose $E_{\text{tot}} = E_{\text{mat}} + E_{\text{grt}}$ en une partie purement matérielle

$$E_{\text{mat}} = \int U_{\text{mat}} d^3X, \quad (4.381)$$

et une énergie de liaison gravitationnelle

$$E_{\text{grt}} = E_{\text{grf}} + E_{\text{pot}} = \int U_{\text{grt}} d^3X, \quad (4.382)$$

avec en particulier

$$E_{\text{grf}} = \int U_{\text{grf}} d^3X = \frac{1}{8\pi G} \int g^i g_i d^3X, \quad (4.383)$$

$$E_{\text{pot}} = \int U_{\text{pot}} d^3X = \int \phi \rho d^3X. \quad (4.384)$$

Pour une source confinée et en utilisant l'équation de Poisson du champ de gravitation (3.54), nous avons ainsi la relation

$$E_{\text{grt}} = -E_{\text{grf}} = \frac{1}{2} E_{\text{pot}}. \quad (4.385)$$

L'énergie matérielle se décompose également en énergie cinétique et énergie interne $E_{\text{mat}} = E_{\text{cin}} + E_{\text{int}}$

$$E_{\text{cin}} = \int U_{\text{cin}} d^3X, \quad E_{\text{int}} = \int U_{\text{int}} d^3X. \quad (4.386)$$

En particulier, l'énergie interne s'exprime comme

$$E_{\text{int}} = \sum_{\text{x}} \int n_{\text{x}} \chi^{\text{x}} d^3X - \int \Psi d^3X. \quad (4.387)$$

Dans le cas d'une configuration stationnaire, nous aurons en particulier

$$\int T_{\text{tot}i}^i d^3X = 0, \quad (4.388)$$

et en remarquant que

$$\int T_{\text{grt}i}^i d^3X = -E_{\text{grf}}, \quad (4.389)$$

$$\int T_{\text{cin}i}^i d^3X = 2E_{\text{cin}}. \quad (4.390)$$

et

$$\int T_{\text{int}i}^i d^3X = 3 \int \Psi d^3X + \sum_{\text{x}} \int n_{\text{x}}^i \chi_i^{\text{x}} d^3X, \quad (4.391)$$

nous obtenons finalement l'identité suivante

$$E_{\text{grt}} + 2E_{\text{cin}} + 3 \int \Psi d^3X + \sum_{\text{x}} \int n_{\text{x}}^i \chi_i^{\text{x}} d^3X = 0. \quad (4.392)$$

Cette dernière identité est une généralisation de l'identité obtenue par Sedrakian & Wasserman (2001) qui négligèrent les effets d'entraînement. La différence avec leur résultat

est d'une part, le remplacement de la somme des pressions individuelles de chaque fluide $\sum_{\mathbf{x}} P_{\mathbf{x}}$ par la pression généralisée Ψ , et d'autre part la présence de termes impliquant les impulsions chimiques $\chi_i^{\mathbf{x}}$.

Plus généralement, lorsque la configuration du système n'est pas stationnaire la relation (4.379) s'écrit de façon explicite

$$\frac{d^2}{dt^2}Q = 2 \int \left(3\Psi + \sum_{\mathbf{x}} \rho^{\mathbf{x}} v_{\mathbf{x}}^2 + \sum_{\mathbf{x}} \chi_i^{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x}}^i - \frac{1}{8\pi G} g^2 \right) d^3X. \quad (4.393)$$

En particulier, dans le cas d'un seul fluide parfait, la relation (4.393) se réduit au théorème du viriel classique (voir par exemple Collins (1978))

$$\frac{d^2}{dt^2}Q = 2 \int \left(3P + \rho v^2 - \frac{1}{8\pi G} g^2 \right) d^3X. \quad (4.394)$$

Nous pouvons déduire d'autres identités non triviales de la relation générale (4.366), lorsque \mathcal{X} est homogène à une distance. Nous avons déjà obtenu précédemment une loi de conservation pour le moment dipolaire de masse (4.371), en identifiant \mathcal{X} avec une des coordonnées cartésiennes. Une autre application plus intéressante concerne les situations où \mathcal{X} dépend non linéairement des coordonnées cartésiennes.

Dans le cas isotrope, où \mathcal{X} est donné par la distance radiale r , nous avons

$$\mathcal{X} = r \quad \Rightarrow \quad \nabla_i \nabla_j \mathcal{X} = r^{-1} (\gamma_{ij} - \nu_{ri} \nu_{rj}), \quad (4.395)$$

avec ν_r^i le vecteur unitaire dans la direction radiale, défini par

$$\nu_r^i = r^{-1} X^i. \quad (4.396)$$

Puisque dans les coordonnées sphériques $\{r, \theta, \varphi\}$ l'élément de volume est donné par $dX^1 dX^2 dX^3 = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$, la relation générale (4.366) se traduit dans le cas présent par l'identité

$$\frac{d^2}{dt^2} \int \rho r^3 \sin \theta dr d\theta d\varphi = \int (T_{\text{tot}i}^i - T_{\text{tot}}^{ij} \nu_{ri} \nu_{rj}) r \sin \theta dr d\theta d\varphi. \quad (4.397)$$

Nous pouvons déduire de la même façon une autre identité de ce type, en identifiant \mathcal{X} avec la distance ϖ par rapport à un axe de coordonnée X^3 , pour lequel nous avons

$$\mathcal{X} = \varpi \quad \Rightarrow \quad \nabla_i \nabla_j \mathcal{X} = \varpi^{-1} \nu_{\varphi i} \nu_{\varphi j}, \quad (4.398)$$

où ν_{φ}^i est un vecteur unitaire le long de la direction du vecteur de Killing axial correspondant, à savoir

$$\nu_{\varphi}^i = \varpi^{-1} k_3^i, \quad (4.399)$$

dont les composantes sont données par $\nu_{\varphi}^1 = -X^2/\varpi$, $\nu_{\varphi}^2 = X^1/\varpi$, $\nu_{\varphi}^3 = 0$.

En termes des coordonnées cylindriques, spécifiées par $X^1 = \varpi \cos \varphi$, $X^2 = \varpi \sin \varphi$, $X^3 = z$, l'élément de volume est donné par $dX^1 dX^2 dX^3 = \varpi d\varpi dz d\varphi$. Nous voyons ainsi que la relation (4.366) conduit à l'identité

$$\frac{d^2}{dt^2} \int \rho \varpi^2 d\varpi dz d\varphi = \int T_{\text{tot}}^{ij} \nu_{\varphi i} \nu_{\varphi j} d\varpi dz d\varphi. \quad (4.400)$$

En particulier, dans le cas de configurations axisymétriques stationnaires, le membre de gauche de l'équation (4.400) est simplement nul et puisque l'intégrand dans le membre de droite est indépendant de l'angle φ , la relation (4.400) se simplifie comme

$$\int T_{\text{tot}}^{ij} \nu_{\varphi i} \nu_{\varphi j} d\varpi dz = 0. \quad (4.401)$$

Cette relation est la limite newtonienne de l'identité obtenue par Bonazzola (1973), Gourgoulhon & Bonazzola (1994a, 1994b) en relativité générale pour un seul fluide parfait

$$\int \left(P + \rho v^2 - \frac{1}{8\pi G} g^2 \right) d\varpi dz = 0. \quad (4.402)$$

Ces identités que nous avons dérivées de la relation (4.366), ont non seulement un intérêt théorique mais également pratique puisqu'elles permettent notamment de tester la fiabilité des simulations numériques. Par exemple, Bonazzola *et al.* (1998) ont montré dans le cadre d'un modèle newtonien que l'identité (4.402) permet de contrôler les erreurs numériques de la solution (voir figure 4.9).

Nous insistons sur le fait que le théorème du viriel ordinaire (4.392) et le théorème de Bonazzola (4.401) sont deux exemples particuliers de la relation générale pour une configuration stationnaire

$$\int T_{\text{tot}}^{ij} \nabla_i \nabla_j \mathcal{X} d^3X = 0, \quad (4.403)$$

qui est valide pour n'importe quelle une fonction \mathcal{X} , telle que à large distance $\nabla_i \mathcal{X}$ augmente plus lentement que le carré de la distance. Cette condition est évidemment satisfaite en choisissant $\mathcal{X} = r^2$ ce qui conduit au théorème du viriel ordinaire ou en posant $\mathcal{X} = \varpi$ qui mène au théorème de Bonazzola. La relation (4.403) présente l'avantage d'être indépendante de la nature spécifique du modèle à plusieurs fluides considéré. Elle dépend seulement de la conservation du tenseur énergie-impulsion (4.357) et (4.359), et de la conservation de la masse (4.360), qui sont les conditions essentielles de n'importe quel modèle newtonien et sont les seules relations nécessaires pour établir la forme locale du théorème du viriel (4.361). L'identité (4.403) pour une configuration stationnaire est simplement une conséquence de la condition locale d'équilibre

$$\nabla_i \nabla_j T_{\text{tot}}^{ij} = 0, \quad (4.404)$$

déduite de l'équation (4.361).

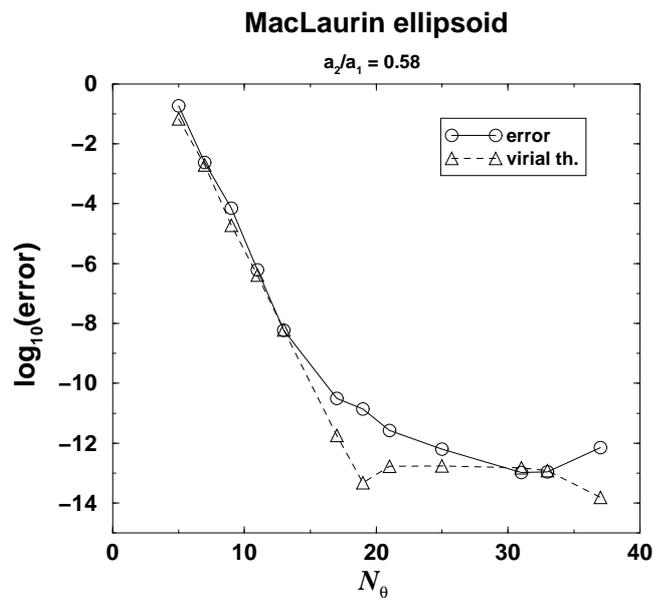


FIGURE 4.9 – Logarithme de l'erreur relative de la solution numérique (l'écarricité) et de l'identité du viriel par rapport à la solution analytique pour un ellipsoïde de densité uniforme en rotation (sphéroïde de Maclaurin) au point de bifurcation de Jacobi-Dedekind. La solution numérique a été obtenue par Bonazzola *et al.* (1998), via une méthode spectrale. L'axe des abscisses représente le nombre de coefficients dans le développement de la solution. Le graphique met en évidence la corrélation entre la violation de l'identité (4.402) et l'erreur de la solution numérique.

Chapitre 5

Modèle à deux fluides pour une étoile à neutrons

Sommaire

5.1	Introduction	119
5.2	Modèle à deux fluides pour le manteau d'une étoile à neutrons	120
5.3	Modèle à deux fluides pour l'écorce interne	124
5.4	Evaluation des masses effectives	129

5.1 Introduction

Les études microscopiques des états de la matière aux densités et pressions prévalant dans une étoile à neutrons révèlent une structure stratifiée dans laquelle plusieurs phases coexistent. Ainsi les couches périphériques de l'étoile sont formées d'une écorce solide imprégnée d'un gaz uniforme d'électrons et à des profondeurs plus importantes, d'un superfluide de neutrons. L'intérieur de l'étoile est composé pour l'essentiel d'un mélange homogène constitué d'un superfluide de neutrons, d'un superfluide de protons et d'un gaz d'électrons sans exclure toutefois la présence d'autres particules ou d'autres phases plus ou moins exotiques comme par exemple un plasma de quarks et de gluons comme nous l'avons signalé dans le chapitre 1.

L'existence de ces différentes phases, notamment la présence d'une écorce solide, se manifeste à l'échelle macroscopique par un certain nombre de phénomènes observables. Par exemple, les irrégularités constatées dans la période de rotation de certains pulsars (voir chapitre 2) proviendraient d'un transfert discontinu de moment cinétique entre la croûte et le superfluide de neutrons. Néanmoins le mécanisme à l'origine de ces sauts de fréquence est encore mal compris.

Il a été également suggéré par Epstein (1988) et par Mendell (1991b), puis confirmé par des simulations numériques, tant en mécanique newtonienne (voir Lindblom & Mendell (1994), Lee (1995), Prix & Rieutord (2002), Yoshida & Lee (2003a), Lee & Yoshida (2003), Prix *et al.* (2004)) qu'en relativité générale (voir Comer *et al.* (1999), Andersson & Comer (2001a), Yoshida & Lee (2003b)), que la présence d'un mélange de superfluides de neutrons et de protons dans une étoile à neutrons donnait lieu à un nouveau type de modes d'oscillations, baptisés des modes superfluides. Ces modes sont rétrogrades et sont très sensibles à l'effet d'entraînement entre les deux fluides. L'influence d'une croûte solide, en particulier sur la dissipation de ces modes, reste à préciser. L'étude des modes d'oscillation par l'analyse des ondes gravitationnelles émises par une étoile à neutrons, permettra dans quelques années de sonder la structure interne de l'étoile (voir par exemple Andersson & Comer (2001b) et Andersson (2003)).

Afin d'éclaircir le rôle de l'écorce dans la dynamique d'une étoile à neutrons et d'améliorer ainsi l'interprétation des observations, nous avons adapté un modèle à deux fluides, originellement développé pour décrire le coeur de l'étoile.

5.2 Modèle à deux fluides pour le manteau d'une étoile à neutrons

Nous commencerons tout d'abord par décrire de façon succincte le modèle à deux fluides qui a été développé pour décrire le coeur externe d'une étoile à neutrons, supposé composé uniquement de neutrons, protons et électrons (voir Sauls (1989) et les références citées).

Les calculs microscopiques (voir Bender *et al.* (2003)) indiquent que l'intérieur d'une étoile à neutrons froide (c'est-à-dire en excluant la phase de formation de l'étoile) est formé d'un superfluide de neutrons, d'un supraconducteur de protons et d'un gaz d'électrons. Néanmoins, les températures critiques de superfluidité et l'étendue des régions superfluides sont très sensibles aux effets de milieu et varient d'un modèle à l'autre.

Par ailleurs, les protons, les électrons et les noyaux constituant l'écorce solide sont fortement couplés par le champ magnétique si bien que l'ensemble de ces particules chargées peuvent être assimilées à un seul fluide (voir Easson (1979a, 1979b)). Contrairement au superfluide de neutrons, ce plasma ralentit par l'effet du rayonnement électromagnétique, discuté dans le chapitre 2. Le ralentissement du pulsar engendre ainsi une rotation différentielle entre le superfluide de neutrons et les particules chargées. Il apparaît donc naturel de traiter une étoile à neutrons comme un mélange de deux fluides avec d'une part un superfluide de neutrons et d'autre part un plasma de particules chargées.

Le gaz d'électrons donne lieu à un courant électrique. Ce courant électrique est important en ce qui concerne les effets magnétiques, néanmoins son influence est négligeable dans les phénomènes de transport de masse qui nous intéressent. C'est pourquoi, dans la suite nous ignorerons les électrons dont la masse est environ 1840 fois plus petite que la masse d'un nucléon.

Nous nous placerons dans un cadre purement newtonien. Une telle approximation n'est

pas réaliste parce que les distorsions de l'espace-temps induites par le champ de gravitation de l'étoile sont importantes comme nous l'avons d'ailleurs souligné au premier chapitre. Cependant, elle présente l'avantage de fournir des équations d'évolution plus simples à résoudre que leurs analogues en relativité générale et facilite ainsi les études qualitatives. Nous avons d'ailleurs cité précédemment des études sur les modes d'oscillation d'une étoile à neutrons dans la théorie de Newton.

Dans ce modèle (voir également Mendell (1991a, 1991b), Lindblom & Mendell (1994), Lee (1995)), l'étoile est donc assimilée à un mélange de deux fluides, avec d'une part un superfluide de neutrons d'indice chimique n et d'autre part un supraconducteur de protons d'indice chimique p . De plus nous ferons l'hypothèse que le courant baryonique total est conservé, autrement dit nous avons

$$\nabla_{\mu} n_b^{\mu} = 0, \quad (5.1)$$

avec $n_b^{\mu} = n_n^{\mu} + n_p^{\mu}$. Les courants de neutrons et de protons ne sont pas séparément conservés du fait des interactions faibles qui autorisent des transformations entre neutrons et protons sans changer toutefois le nombre total de nucléons. La conservation de la masse totale du système impose la condition supplémentaire

$$\nabla_{\mu} \rho^{\mu} = 0, \quad (5.2)$$

où ρ^{μ} est le courant total de masse défini par

$$\rho^{\mu} = m_n n_n^{\mu} + m_p n_p^{\mu}. \quad (5.3)$$

Les conditions (5.1) et (5.2) impliquent notamment que $m_n = m_p$. En réalité cette relation n'est qu'approchée ($m_n - m_p \simeq 1.3 \text{ MeV}/c^2$, ce qui représente environ 0.1% de la masse d'un nucléon) et reflète une limitation de la théorie newtonienne dans laquelle la masse est conservée indépendamment de l'énergie. Dans la suite nous désignerons par m la masse d'un nucléon en négligeant la différence de masse entre neutron et proton.

La vorticit  dans un superfluide est quantifi e sous la forme de tourbillons. Nous consid rerons dans la suite, des particules de fluides dont les dimensions sont grandes devant l' chelle des tourbillons de fa on   ce que la vorticit  varie quasi contin ment   l' chelle de la description hydrodynamique. La distance moyenne l_V entre deux plus proches tourbillons est d finie par

$$l_V = n_V^{-1/2}, \quad (5.4)$$

o  n_V est la densit  surfacique de tourbillons donn e en fonction de la fr quence $\Omega = 2\pi/P$ du pulsar et de la constante de Planck h par la formule

$$n_V = \frac{4m_n\Omega}{h} \simeq \frac{10^4}{P(\text{s})} \text{ cm}^{-2}. \quad (5.5)$$

La distance entre les tourbillons varie donc entre 10^{-2} cm ($P \sim 1 \text{ s}$)   10^{-3} cm ($P \sim 10 \text{ ms}$). Les diff rentes  chelles sont r sum es dans le tableau 5.1.

TABLEAU 5.1 – Échelles caractéristiques. a désigne la distance entre deux plus proches noyaux, qui varie de quelques fermis à l'interface entre la croûte et le manteau à une centaine de fermis dans les couches les moins profondes de l'écorce interne. l_V est la distance entre deux plus proches tourbillons superfluides définie par l'équation (5.4).

Échelles	Distances l caractéristiques
microscopique	$l \ll a$
mésoscopique	$a \ll l \ll l_V$
macroscopique	$l \gg l_V$

En appliquant directement le formalisme du chapitre 4, chaque fluide est ainsi décrit par un quadrivecteur courant n_x^μ avec l'indice chimique $x = n, p$. Nous supposons que les deux superfluides sont couplés par des effets d'entraînement, du même type que ceux dans des mélanges ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$. La densité Lagrangienne Λ_{int} associée à l'énergie interne du milieu est donc une fonction des courants n_n^μ et n_p^μ . A cette contribution, s'ajoutent les densités cinétique Λ_{cin} et potentielles Λ_{pot} données par

$$\Lambda_{\text{cin}} = n_n^\mu p_\mu^n + n_p^\mu p_\mu^p, \quad (5.6)$$

$$\Lambda_{\text{pot}} = -\rho^\mu t_\mu \phi, \quad (5.7)$$

avec les impulsions cinétiques correspondantes p_x^μ définies par (4.139).

L'écoulement des deux superfluides est gouverné par des équations d'Euler

$$n_p^\mu \varpi_{\mu\nu}^p - \mathcal{D}_p \pi_\mu^p = f_\mu^p, \quad n_n^\mu \varpi_{\mu\nu}^n - \mathcal{D}_n \pi_\mu^n = f_\mu^n. \quad (5.8)$$

en termes des impulsions généralisées

$$\pi_\mu^n = \frac{\partial \Lambda}{\partial n_n^\mu}, \quad \pi_\mu^p = \frac{\partial \Lambda}{\partial n_p^\mu}, \quad (5.9)$$

et des vorticités associées

$$\varpi_{\mu\nu}^n \equiv 2\nabla_{[\mu} \pi_{\nu]}^n, \quad \varpi_{\mu\nu}^p \equiv 2\nabla_{[\mu} \pi_{\nu]}^p. \quad (5.10)$$

Nous avons introduit les taux de destructions de particules \mathcal{D}_p et \mathcal{D}_n par

$$\mathcal{D}_p \equiv -\nabla_\mu n_p^\mu, \quad \mathcal{D}_n \equiv -\nabla_\mu n_n^\mu. \quad (5.11)$$

Comme seul le courant baryonique est conservé, les courants individuels de neutrons et de protons ne le sont pas nécessairement. Ceci se traduit par un terme de force supplémentaire dans l'équation d'Euler.

Dans la formulation traditionnelle en décomposition 3+1, ces équations peuvent se réécrire sous la forme

$$\rho_n \partial_t v_n^i + \rho_n v_n^j \nabla_j v_n^i + n_n \partial_t \chi_i^n + n_n v_n^j \nabla_j \chi_i^n - n_n^j \nabla_i \chi_j^n + n_n \nabla_i (m\phi + \chi^n) = f_i^n + \mathcal{D}_n (m v_{ni} + \chi_i^n), \quad (5.12)$$

$$\rho_p \partial_t v_p^i + \rho_p v_p^j \nabla_j v_p^i + n_p \partial_t \chi_i^p + n_p v_p^j \nabla_j \chi_i^p - n_p^j \nabla_i \chi_j^p + n_p \nabla_i (m\phi + \chi^p) = f_i^p + \mathcal{D}_p (m v_{pi} + \chi_i^p). \quad (5.13)$$

avec

$$\chi^n = \frac{\partial \Lambda_{\text{int}}}{\partial n_n}, \quad \chi^p = \frac{\partial \Lambda_{\text{int}}}{\partial n_p}. \quad (5.14)$$

L'effet d'entraînement se manifeste dans les équations d'Euler (5.12) et (5.13) par la présence de termes dépendant des impulsions chimiques χ_j^n et χ_j^p définies par

$$\chi_i^n = \frac{\partial \Lambda_{\text{int}}}{\partial n_n^i}, \quad \chi_i^p = \frac{\partial \Lambda_{\text{int}}}{\partial n_p^i}. \quad (5.15)$$

Ces impulsions chimiques ne sont pas indépendantes puisque d'après l'identité de Noether (4.247) nous avons

$$n_p \chi_j^p + n_n \chi_j^n = 0. \quad (5.16)$$

C'est la raison pour laquelle les équations d'Euler (5.12) et (5.13) pour les deux superfluides sont couplées.

Ces équations se simplifient si le système est isolé, c'est-à-dire $f_i^n + f_i^p = 0$. Lorsque les temps considérés dans la description hydrodynamique sont très courts devant les temps caractéristiques des réactions faibles, par exemple dans l'étude des modes d'oscillations de l'étoile, les courants de neutrons et de protons peuvent être considérés comme séparément conservés avec une bonne approximation ce qui conduit aux relations $\mathcal{D}_p = 0 = \mathcal{D}_n$.

Les effets d'entraînement se traduisent en général par le fait que les impulsions de chacun des fluides ne sont pas alignées avec les courants correspondants. En utilisant des notations plus familières, notamment en introduisant des « vitesses superfluides »

$$V_p^i = \gamma^{ij} \frac{\pi_j^p}{m}, \quad V_n^i = \gamma^{ij} \frac{\pi_j^n}{m} \quad (5.17)$$

et les courants de masse

$$\rho_p^i = m n_p^i, \quad \rho_n^i = m n_n^i \quad (5.18)$$

nous pouvons écrire des relations du type

$$\begin{aligned} \rho_p^i &= \rho_{pp} V_p^i + \rho_{pn} V_n^i, \\ \rho_n^i &= \rho_{nn} V_n^i + \rho_{np} V_p^i. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Les éléments ρ_{nn} , ρ_{pp} , ρ_{pn} et ρ_{np} sont homogènes à des densités de masses. Dans la littérature sur la superfluidité, une confusion persiste, depuis le modèle historique à deux fluides de Landau, entre vitesses v_x^i (tenseurs intrinsèquement contravariants) et « vitesses superfluides » V_x^i qui sont proportionnelles à des impulsions π_i^x (tenseurs intrinsèquement covariants) et ne peuvent donc s'identifier avec les vitesses de particules. Nous prendrons garde dans la suite à bien distinguer ces deux quantités.

Il est souvent plus intuitif de faire apparaître des masses, c'est pourquoi nous poserons

$$\rho_{nn} \equiv \rho_n \frac{m}{m_*^n}, \quad \rho_{pp} = \rho_p \frac{m}{m_*^p} \quad (5.20)$$

où m_*^n et m_*^p représentent des masses effectives par particule associées à chacun des fluides. Le principe de relativité sous la forme de l'identité de Noether (5.16) impose que

$$\rho_{np} = \rho_{pn} = \rho_n \frac{m_*^n - m}{m_*^n} = \rho_p \frac{m_*^p - m}{m_*^p}. \quad (5.21)$$

Ces dernières relations donnent une interprétation très intuitive des masses effectives puisque les effets d'entraînements disparaissent lorsque celles-ci sont égales aux masses ordinaires $m_*^p = m$ et $m_*^n = m$.

Borumand *et al.* (1996) ont montré comment calculer les masses effectives dans la théorie des liquides de Fermi, en négligeant l'appariement des nucléons à l'origine de la superfluidité des neutrons et des protons. Ces masses effectives sont typiquement inférieures aux masses non renormalisées correspondantes.

Comer & Joynt (2003) ont récemment généralisé le modèle à deux fluides pour le coeur de l'étoile à neutrons (sur la base du même modèle standard composé de neutrons, protons et électrons) pour lequel les effets relativistes sont importants. Ils ont montré comment évaluer les coefficients d'entraînement avec un modèle de champ moyen relativiste dans l'approximation de Hartree, en négligeant aussi les effets d'appariement entre nucléons.

5.3 Modèle à deux fluides pour l'écorce interne

Les sauts de fréquence observés dans le signal de certains pulsars, s'interprètent comme un brusque transfert de moment cinétique entre une composante superfluide et l'écorce solide d'une étoile à neutrons. Néanmoins le mécanisme à l'origine de ce transfert n'est pas encore très bien compris (voir la discussion du chapitre 2). S'agit-il d'une avalanche de tourbillons superfluides ? de tremblements de croûtes ? d'un déficit de forces centrifuge ? ou comme l'ont récemment suggéré Andersson *et al.* (2004) d'une instabilité de type Kelvin-Helmholtz ? Par ailleurs, la présence d'une écorce solide pourrait fortement influencer les modes d'oscillation d'une étoile à neutrons (voir Andersson (2003) et les références citées). Une meilleure compréhension de ces phénomènes nécessite donc de considérer des modèles d'étoile à neutrons qui tiennent compte explicitement de l'écorce solide.

L'écorce externe d'une étoile à neutrons est formée d'un solide Coulombien de noyaux fortement enrichis en neutrons. A des densités supérieures à 10^{11} g.cm⁻³ délimitant la région interne de l'écorce jusqu'à environ 10^{14} g.cm⁻³ lorsque neutrons et protons forment une phase homogène, certains neutrons suintent des noyaux et forment une phase superfluide. L'écorce est également imprégnée d'un gaz uniforme d'électrons relativistes, que nous ignorerons comme dans la section précédente.

L'existence d'un superfluide de neutrons dans l'écorce interne d'une étoile à neutrons, à des densités supérieures à environ 10^{11} g.cm⁻³ est bien établie, à la fois théoriquement par

des études microscopiques de la matière nucléaire et expérimentalement par l'observation des pulsars. En effet, la superfluidité des nucléons et en particulier des neutrons, dont l'existence a été prédite par Migdal (1959) bien avant la découverte des premiers pulsars, est en accord avec l'observation de très longs temps de relaxation à la suite d'un saut de fréquence.

Nous suivrons l'approche de Baym *et al.* (1969) qui consiste à distinguer deux composantes à l'intérieur d'une étoile à neutrons : un superfluide et une écorce solide. Nous proposons d'adapter le modèle à deux fluides décrit dans la section précédente de façon à inclure la région interne de la croûte, en considérant le mélange d'un superfluide de neutrons d'indice chimique f et d'un fluide d'indice c , associé aux nucléons confinés dans les noyaux. Par simplicité, nous négligeons donc les contraintes anisotropiques engendrées par des déformations élastiques de l'écorce solide ou par un champ magnétique. Nous supposons que les fluides sont couplés par des effets non dissipatifs d'entraînement uniquement. Comme dans la section précédente, nous négligerons la différence de masse entre neutron et proton. La masse par particule de chacun des fluides (masse d'un nucléon) sera notée m .

Nous travaillerons dans le formalisme covariant de l'hydrodynamique dans un espace-temps newtonien développé aux chapitres 3 et 4. La motivation est avant tout de faciliter le lien entre la description hydrodynamique et l'analyse microphysique, qui est essentiellement non relativiste. En effet, dans la région de l'écorce qui nous intéresse, de 10^{11} g/cm³ jusqu'à environ 10^{14} g/cm³, les énergies par nucléons sont typiquement de l'ordre de quelques dizaine de MeV tout au plus, ce qui représente seulement 1% de leur énergie de masse. Par ailleurs, un traitement newtonien de la gravitation est une approximation assez bonne dans une région suffisamment localisée (de l'ordre du cm ou moins) de l'écorce.

Dans un voisinage suffisamment petit, nous pouvons négliger les variations du potentiel gravitationnel. De plus en choisissant comme origine $\phi = 0$, nous pouvons identifier la densité Lagrangienne totale $\Lambda \equiv \Lambda_{\text{mat}} + \Lambda_{\text{pot}}$ avec seulement la contribution matérielle $\Lambda \simeq \Lambda_{\text{mat}}$. La densité Lagrangienne Λ associée à ce modèle est donc uniquement une fonction des courants n_c^ν et n_f^ν , dont la variation est donnée en termes des impulsions matérielles μ_ν^f et μ_ν^c respectivement du superfluide et de l'écorce par

$$\delta\Lambda = \mu_\nu^f \delta n_f^\nu + \mu_\nu^c \delta n_c^\nu, \quad (5.22)$$

ou de façon équivalente en décomposition 3+1

$$\delta\Lambda = \mu_0^f \delta n_f + \mu_i^f \delta n_f^i + \mu_0^c \delta n_c + \mu_i^c \delta n_c^i. \quad (5.23)$$

La densité Lagrangienne s'exprime donc sous la forme

$$\Lambda = n_c^\nu \mu_\nu^c + n_f^\nu \mu_\nu^f + \Psi \quad (5.24)$$

avec la pression généralisée Ψ définie par

$$\Psi = \Lambda - n_c^\nu \mu_\nu^c - n_f^\nu \mu_\nu^f. \quad (5.25)$$

La densité d'énergie U est spécifiée par

$$U = -\mu_0^f n_f - \mu_0^c n_c - \Psi, \quad (5.26)$$

soit encore

$$U = \mu_i^f n_f^i + \mu_i^c n_c^i - \Lambda. \quad (5.27)$$

En supposant que les vitesses en jeu sont faibles, la densité Lagrangienne Λ se décompose alors en une contribution interne statique $\Lambda_{\text{ins}} = -U_{\text{ins}}$ et une contribution dynamique $\Lambda_{\text{dyn}} = U_{\text{dyn}}$ qui à l'ordre le plus bas est une fonction quadratique des courants de la forme

$$\Lambda_{\text{dyn}} = \frac{1}{2} \gamma_{ij} (\mathcal{K}^{\text{ff}} n_f^i n_f^j + 2\mathcal{K}^{\text{fc}} n_f^i n_c^j + \mathcal{K}^{\text{cc}} n_c^i n_c^j). \quad (5.28)$$

Les coefficients \mathcal{K}^{ff} , \mathcal{K}^{cc} et \mathcal{K}^{fc} doivent de plus satisfaire la condition

$$\mathcal{K}^{\text{ff}} \mathcal{K}^{\text{cc}} - (\mathcal{K}^{\text{fc}})^2 > 0, \quad (5.29)$$

ce qui garantit que la densité d'énergie dynamique $U_{\text{dyn}} = \Lambda_{\text{dyn}}$ est toujours définie positive et ainsi la configuration statique a une énergie inférieure à une configuration avec courants. En calculant les dérivées partielles de Λ par rapport aux 3-courants n_f^i et n_c^i (n_c et n_f étant fixées), les impulsions matérielles sont alors reliées aux courants par

$$\mu_i^f = \gamma_{ij} (\mathcal{K}^{\text{ff}} n_f^j + \mathcal{K}^{\text{fc}} n_c^j), \quad \mu_i^c = \gamma_{ij} (\mathcal{K}^{\text{fc}} n_f^j + \mathcal{K}^{\text{cc}} n_c^j). \quad (5.30)$$

Comme dans le modèle de la section précédente, l'impulsion d'un fluide n'est en général pas alignée avec le courant correspondant. Les coefficients \mathcal{K}^{ff} , \mathcal{K}^{cc} et \mathcal{K}^{fc} sont les coefficients d'entraînement, associés à des masses effectives « macroscopiques » (c'est-à-dire à une échelle grande devant la distance entre les tourbillons) m_\star^f et m_\star^c définies en posant

$$\mathcal{K}^{\text{ff}} \equiv \frac{m_\star^f}{n_f}, \quad \mathcal{K}^{\text{cc}} \equiv \frac{m_\star^c}{n_c}. \quad (5.31)$$

En introduisant les 3-impulsions chimiques χ_i^f et χ_i^c définies par

$$\chi_i^f = \frac{\partial \Lambda_{\text{int}}}{\partial n_f^i}, \quad \chi_i^c = \frac{\partial \Lambda_{\text{int}}}{\partial n_c^i}, \quad (5.32)$$

les impulsions matérielles s'expriment par

$$\mu_i^f = m v_{fi} + \chi_i^f, \quad \mu_i^c = m v_{ci} + \chi_i^c. \quad (5.33)$$

Le coefficient non diagonal \mathcal{K}^{fc} s'obtient alors directement par l'identité de Noether (4.247) qui s'écrit, sous la forme

$$n_c \chi_i^c + n_f \chi_i^f = 0. \quad (5.34)$$

En utilisant les équations (5.30) et (5.33) avec la relation (5.34) nous avons

$$n_f ((m_\star^f - m) + n_c \mathcal{K}^{\text{fc}}) v_f^i + n_c ((m_\star^c - m) + n_f \mathcal{K}^{\text{fc}}) v_c^i = 0. \quad (5.35)$$

Puisque cette relation doit être satisfaite pour des 3-vitesses v_f^i et v_c^i quelconques, nous en déduisons finalement les identités

$$\mathcal{K}^{fc} = \frac{m - m_\star^f}{n_c} = \frac{m - m_\star^c}{n_f}. \quad (5.36)$$

Par conséquent, un seul des trois coefficients d'entraînement \mathcal{K}^{ff} , \mathcal{K}^{cc} et \mathcal{K}^{fc} est inconnu et doit être déterminé par la microphysique. La relation (5.36) montre également que si l'une des masses effectives est supérieure à la masse ordinaire, l'autre le sera également et réciproquement.

Les 3-impulsions peuvent finalement s'exprimer sous la forme

$$\mu_i^f = \gamma_{ij} (m_\star^f v_f^j + (m - m_\star^f) v_c^j), \quad \mu_i^c = \gamma_{ij} (m_\star^c v_c^j + (m - m_\star^c) v_f^j). \quad (5.37)$$

Dans les notations de Prix (2004), en introduisant la vitesse relative $\Delta^j \equiv v_c^j - v_f^j$, nous avons

$$\mu_i^f = \gamma_{ij} (m v_f^j + m \varepsilon_f \Delta^j), \quad \mu_i^c = \gamma_{ij} (m v_c^j - m \varepsilon_c \Delta^j), \quad (5.38)$$

avec les coefficients d'entraînement sans dimension définis par

$$\varepsilon_f \equiv \frac{m - m_\star^f}{m}, \quad \varepsilon_c \equiv \frac{m - m_\star^c}{m}. \quad (5.39)$$

Avec la relation (5.36), les deux coefficients d'entraînement vérifient

$$\frac{\varepsilon_f}{\varepsilon_c} = \frac{n_c}{n_f}. \quad (5.40)$$

La limite de fluides indépendants sans entraînement est donc associée à des masses effectives égales à la masse ordinaire $m_\star^f = m = m_\star^c$, c'est-à-dire à des coefficients d'entraînement $\varepsilon_f = 0 = \varepsilon_c$. Les relations entre courants et impulsions sont inversibles d'après la condition (5.29) sur les coefficients d'entraînement. Nous pouvons donc poser

$$n_f^i = \gamma^{ij} (\mathcal{K}_{ff} \mu_j^f + \mathcal{K}_{fc} \mu_j^c), \quad n_c^i = \gamma^{ij} (\mathcal{K}_{fc} \mu_j^c + \mathcal{K}_{cc} \mu_j^c). \quad (5.41)$$

Ces nouveaux coefficients d'entraînement sont reliés aux précédents par

$$\mathcal{K}_{ff} = \frac{\mathcal{K}^{cc}}{\mathcal{K}^{ff} \mathcal{K}^{cc} - (\mathcal{K}^{fc})^2}, \quad \mathcal{K}_{fc} = \frac{-\mathcal{K}^{fc}}{\mathcal{K}^{ff} \mathcal{K}^{cc} - (\mathcal{K}^{fc})^2}, \quad \mathcal{K}_{cc} = \frac{\mathcal{K}^{ff}}{\mathcal{K}^{ff} \mathcal{K}^{cc} - (\mathcal{K}^{fc})^2}. \quad (5.42)$$

La densité d'énergie dynamique peut alors se réécrire avec ces nouveaux coefficients uniquement en termes des 3-impulsions sous la forme

$$U_{\text{dyn}} = \frac{1}{2} \gamma^{ij} (\mathcal{K}_{ff} \mu_i^f \mu_j^f + 2 \mathcal{K}_{fc} \mu_i^f \mu_j^c + \mathcal{K}_{cc} \mu_i^c \mu_j^c). \quad (5.43)$$

Ces nouveaux coefficients d'entraînement déterminent d'autres masses effectives

$$\mathcal{K}_{ff} \equiv \frac{n_f}{m_\star^f}, \quad \mathcal{K}_{cc} \equiv \frac{n_c}{m_\star^c}. \quad (5.44)$$

Les coefficients non diagonaux sont alors donnés dans cette description alternative par

$$\mathcal{K}_{fc} = \frac{n_f}{m_*^f} \frac{m_*^f - m}{m} = \frac{n_c}{m_*^c} \frac{m_*^c - m}{m}. \quad (5.45)$$

Les effets d'entraînement disparaissent dans la limite où $m_*^f = m_*^c = m$.

Dans les notations plus traditionnelles, nous pouvons exprimer les courants de masses en termes des « vitesses superfluides » $V_f^i = \gamma^{ij} \mu_j^f$ et $V_c^i = \gamma^{ij} \mu_j^c$ par

$$\rho_f^i = \rho_{ff} V_f^i + \rho_{fc} V_c^i, \quad \rho_c^i = \rho_{fc} V_f^i + \rho_{cc} V_c^i, \quad (5.46)$$

avec les densités de masses données par

$$\rho_{ff} \equiv \rho_f \frac{m}{m_*^f}, \quad \rho_{cc} \equiv \rho_c \frac{m}{m_*^c}, \quad \rho_{fc} \equiv \rho_f \frac{m_*^f - m}{m_*^f} = \rho_c \frac{m_*^c - m}{m_*^c}. \quad (5.47)$$

Les deux définitions alternatives de masses effectives (5.31) et (5.45), sont reliées par les formules

$$m_*^f - m = \frac{m}{m_*^c} (m_*^f - m), \quad m_*^c - m = \frac{m}{m_*^f} (m_*^c - m). \quad (5.48)$$

Il est important de remarquer que quelle que soit la définition adoptée pour la masse effective, si l'une d'entre elles est supérieure ou inférieure à la masse ordinaire, par exemple $m_*^f \geq m$ alors toutes les autres le seront également $m_*^c, m_*^f \geq m$ par les équations (5.36), (5.45) et (5.48).

La contrainte (5.29) sur les coefficients d'entraînement s'exprime en termes des masses effectives (5.31), à l'aide des équations (5.36), comme

$$\frac{m_*^c}{m} > \frac{n_c}{n_c + n_f}, \quad (5.49)$$

ou de façon équivalente

$$\frac{m_*^f}{m} > \frac{n_f}{n_f + n_c}. \quad (5.50)$$

Avec les masses effectives duales (5.44), nous avons la condition

$$\frac{m_*^c}{m} < \frac{n_f + n_c}{n_c} \iff \frac{m_*^f}{m} < \frac{n_f + n_c}{n_f}. \quad (5.51)$$

La densité d'énergie dynamique s'exprime sous une forme plus familière en décomposant la partie purement cinétique U_{cin} , définie par

$$U_{\text{cin}} \equiv \frac{1}{2} m (n_f v_f^2 + n_c v_c^2), \quad (5.52)$$

et la contribution d'entraînement U_{ent}

$$U_{\text{ent}} \equiv U_{\text{dyn}} - U_{\text{cin}}. \quad (5.53)$$

En utilisant l'équation (5.28), nous avons

$$U_{\text{ent}} \equiv \frac{1}{2} n_f (m_{\star}^f - m) (v_f^i - v_c^i) (v_f^j - v_c^j) \gamma_{ij}, \quad (5.54)$$

qui est équivalent à

$$U_{\text{ent}} = \frac{1}{2} n_c (m_{\star}^c - m) (v_f^i - v_c^i) (v_f^j - v_c^j) \gamma_{ij}. \quad (5.55)$$

Dans les notations de Prix (2004), la densité d'énergie associée à l'entraînement (5.55) s'exprime par la formule

$$U_{\text{ent}} = -\frac{1}{2} \rho_f \varepsilon_f \Delta^i \Delta^j \gamma_{ij} = -\frac{1}{2} \rho_c \varepsilon_c \Delta^i \Delta^j \gamma_{ij}. \quad (5.56)$$

5.4 Evaluation des masses effectives

5.4.1 Etude microscopique

Le calcul des coefficients d'entraînement nécessite un traitement microscopique. Les masses effectives résultent des interactions entre les particules des deux fluides, plus précisément les neutrons du superfluide et les noyaux. Dans la suite, nous supposons connue la structure du solide et la composition des noyaux et nous traiterons ces derniers comme des particules classiques. Nous ne nous intéresserons ainsi qu'aux neutrons, qu'ils soient confinés à l'intérieur des noyaux ou qu'ils soient libres. D'ailleurs la distinction entre les deux est plus ou moins arbitraire puisque par effet tunnel quantique les neutrons dans le noyau ne sont pas strictement localisés mais une probabilité, certe exponentiellement décroissante mais non nulle, de sortir des noyaux. Nous négligerons également les inhomogénéités induites par la présence des tourbillons superfluides.

La configuration d'équilibre d'un ensemble de neutrons se déduit par minimisation de la densité d'énergie U dans le référentiel du solide, définie comme la valeur moyenne d'un Hamiltonien total \hat{H} entre des états quantiques du système $|\Psi\rangle$ avec la normalisation

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1, \quad (5.57)$$

$$U \equiv \frac{1}{\mathcal{V}} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle, \quad (5.58)$$

dans un volume mésoscopique \mathcal{V} donné (grand devant les échelles microscopiques, telles que la distance entre noyaux, et petit devant la distance de séparation entre les tourbillons superfluides de telle sorte que le courant soit essentiellement uniforme dans ce volume) avec les conditions de périodicité de Born-Von Kàrmàn. La conservation du nombre N de neutrons et donc de la densité n_n (puisque le volume \mathcal{V} est fixé) conduit à la minimisation contrainte de la densité d'énergie

$$U' \equiv U - \mu n_n, \quad (5.59)$$

dans laquelle le multiplicateur de Lagrange μ s'interprète comme le potentiel chimique des neutrons. La densité n_n est donnée, à partir de l'opérateur densité locale $\hat{n}_n\{\mathbf{r}\}$ défini par une somme de distributions de Dirac pour les N particules présentes dans le volume \mathcal{V}

$$\hat{n}_n\{\mathbf{r}\} = \sum_{\alpha=1}^N \delta\{\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha\}, \quad (5.60)$$

(\mathbf{r}_α désigne le vecteur position attaché à la particule α) comme la moyenne dans le volume \mathcal{V}

$$n_n = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r \langle \Psi | \hat{n}_n\{\mathbf{r}\} | \Psi \rangle. \quad (5.61)$$

Pour une densité n_n donnée, l'état fondamental de plus basse énergie est en général un état statique, pour lequel le courant relatif de neutrons par rapport à l'écorce est nul. Les configurations qui nous intéressent sont au contraire des états de conduction, c'est-à-dire avec un courant n^i non nul. Pour cela, il est nécessaire d'introduire une nouvelle contrainte en minimisant la densité d'énergie

$$U'_{\{p\}} \equiv U' - p_i n^i = U - \mu n_n - p_i n^i. \quad (5.62)$$

Le multiplicateur de Lagrange p_i représente une impulsion effective par particule (à ne pas confondre avec l'impulsion cinétique définie par (4.139)). L'opérateur courant local $\hat{n}^i\{\mathbf{r}\}$ est défini par

$$\hat{n}^i\{\mathbf{r}\} \equiv \sum_{\alpha=1}^N \delta\{\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha\} \hat{v}^i, \quad (5.63)$$

où nous avons défini l'opérateur vitesse d'après le théorème d'Ehrenfest (voir par exemple Cohen-Tannoudji *et al.* (1998)) par le commutateur

$$\hat{v}^i \equiv \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}^i, \hat{H}] \quad (5.64)$$

en notant x^i les coordonnées du vecteur position \mathbf{r} . La densité de courant n^i est alors donnée par

$$n^i = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r \langle \Psi | \hat{n}^i\{\mathbf{r}\} | \Psi \rangle. \quad (5.65)$$

Une variation infinitésimale de la densité d'énergie $U'_{\{p\}}$ au voisinage de la configuration d'équilibre est nécessairement nulle d'où

$$\delta U = \mu \delta n_n + p_i \delta n^i, \quad (5.66)$$

ce qui signifie que

$$\mu = \frac{\partial U}{\partial n_n}, \quad p_i = \frac{\partial U}{\partial n^i}. \quad (5.67)$$

Dans la limite de faible courant, la densité d'énergie se décompose à l'ordre le plus bas en une contribution statique $U_{\text{ins}}\{n_n\}$, issue de la minimisation de U' , dépendant uniquement des densités et une contribution dynamique U_{dyn}

$$U = U_{\text{ins}} + U_{\text{dyn}}. \quad (5.68)$$

La densité d'énergie U_{dyn} s'exprime à l'aide d'un tenseur \mathcal{K}^{ij} comme une forme quadratique des courants du type

$$U_{\text{dyn}} \equiv \frac{1}{2} \mathcal{K}_{ij}^{-1} n^i n^j. \quad (5.69)$$

Le courant correspondant est donc donné au premier ordre par la formule

$$n^i = \mathcal{K}^{ij} p_j. \quad (5.70)$$

Le tenseur de *mobilité* \mathcal{K}^{ij} est en général anisotrope pour un solide formé d'une structure cristalline, contrairement au cas d'un milieu liquide ou pour un solide désordonné pour lequel le tenseur se réduit à une expression isotrope

$$\mathcal{K}^{ij} = \mathcal{K} \gamma^{ij}, \quad \mathcal{K} \equiv \frac{1}{3} \gamma_{ij} \mathcal{K}^{ij}. \quad (5.71)$$

Cette dernière expression reste néanmoins valide pour une structure cristalline de type cubique.

Le courant s'écrit finalement sous la forme

$$n^i = \mathcal{K} \gamma^{ij} p_j. \quad (5.72)$$

La densité d'énergie dynamique devient

$$U_{\text{dyn}} = \frac{1}{2} \mathcal{K} \gamma^{ij} p_i p_j = \frac{1}{2} \mathcal{K}^{-1} \gamma_{ij} n^i n^j. \quad (5.73)$$

5.4.2 Neutrons de conduction

Par analogie avec les électrons de conduction dans un solide, seule une certaine fraction des neutrons contribuent au courant (de masse). En notant n_f leur densité et \bar{v}^i leur vitesse moyenne dans le *référentiel de l'écorce*, nous pouvons écrire

$$n^i = n_f \bar{v}^i. \quad (5.74)$$

La définition de ces états de conduction, et par suite n_f et \bar{v}^i , est plus ou moins arbitraire. En revanche, la combinaison n^i est physiquement bien définie. Nous avons d'ailleurs esquissé le calcul microscopique de ce courant dans la section précédente.

Le courant baryonique n_b^ν dont les composantes dans les coordonnées aristotéliennes sont simplement $n_b^0 = n_b$ et n_b^i , est physiquement bien déterminé. C'est souvent une très bonne approximation de supposer que ce courant est conservé

$$\nabla_\nu n_b^\nu = 0. \quad (5.75)$$

Le courant baryonique

$$n_b^\nu = n_c^\nu + n_f^\nu, \quad (5.76)$$

se décompose en une contribution fluide issue des neutrons de conduction n_f^ν et une contribution associées aux nucléons confinés dans les noyaux n_c^ν qui s'exprime en fonction de la densité de courant n_I^ν des noyaux (ions) de nombre atomique moyen A de l'ordre de 10^2 (voir par exemple Douchin & Haensel (2000)), sous la forme

$$n_c^\nu = An_I^\nu. \quad (5.77)$$

La définition du nombre atomique A est ambiguë du fait que la distinction entre neutrons liés et non liés aux noyaux est plus ou moins floue. Une décomposition plus traditionnelle,

$$n_b^\nu = n_n^\nu + n_p^\nu, \quad (5.78)$$

consiste à distinguer le courant de neutrons n_n^ν et le courant de protons n_p^ν qui s'exprime par

$$n_p^\nu = Zn_I^\nu \quad (5.79)$$

où Z est le nombre moyen de charge d'un noyau, qui contrairement à A est bien défini puisque les protons sont tous confinés dans les noyaux et garde une valeur relativement constante $Z \sim 40$ dans toute l'écorce interne (voir Douchin & Haensel (2000)). En termes des 3-vitesses v_f^i et v_c^i définies par

$$n_f^i \equiv n_f v_f^i, \quad n_c^i = n_c v_c^i, \quad (5.80)$$

et de la vitesse relative entre le superfluide de neutrons et l'écorce solide

$$\bar{v}_{fc} = v_f^i - v_c^i, \quad (5.81)$$

le courant relatif n^ν dans un *référentiel quelconque* est donné dans les coordonnées aristotéliennes par

$$n^0 = n_f, \quad n^i = n_f \bar{v}_{fc}^i. \quad (5.82)$$

Nous avons déjà signalé que à la différence du courant relatif, la spécification de la densité d'états de conduction n_f et leur vitesse v_f^i est plus ou moins arbitraire. Pour le voir, remarquons tout d'abord que la 3- vitesse v_c^i est physiquement bien définie puisqu'elle coïncide avec la vitesse des noyaux donc

$$n_I^i = n_I v_c^i, \quad n_p^i = n_p v_c^i. \quad (5.83)$$

Le courant relatif peut ainsi s'exprimer sous la forme

$$n^i = n_b^i - n_b v_c^i, \quad (5.84)$$

qui est indépendante de la convention choisie pour définir les états de conduction.

5.4.3 Description unifiée

La définition des neutrons de conduction est arbitraire. Cependant, le choix particulier de considérer que tous les neutrons participent au courant en posant $n_f = n_n$, conduit à une description unifiée d'une étoile à neutrons (toujours dans un cadre newtonien) à la fois pour le coeur et pour l'écorce interne à travers un modèle à deux fluides. De cette façon, nous pouvons identifier les deux fluides d'indice chimique f et c , respectivement par le superfluide de neutrons et le fluide de protons qui est supraconducteur seulement dans le coeur. La présence d'une croûte solide est donc simplement modélisée par l'intermédiaire des coefficients d'entraînement.

5.4.4 Lien entre microscopique et macroscopique

Nous pouvons maintenant évaluer les coefficients d'entraînement à partir du tenseur de mobilité \mathcal{K}^{ij} en écrivant la densité d'énergie dynamique dans le référentiel de l'écorce spécifié par $v_c^i = 0$ (soit $n_c^i = 0$)

$$U_{\text{dyn}} = \frac{1}{2}\mathcal{K}^{-1}\gamma_{ij}n^in^j = \frac{1}{2}\mathcal{K}^{\text{ff}}\gamma_{ij}n_f^in_f^j. \quad (5.85)$$

Les coefficient \mathcal{K}^{ff} s'identifie donc à \mathcal{K}^{-1} en notant que $n^i = n_f^i$. La masse effective des neutrons de conduction est donc donnée par la formule

$$m_*^f = \frac{n_f}{\mathcal{K}}. \quad (5.86)$$

Par l'identité de Noether sous la forme (5.36), la masse effective par particule du second fluide est donnée par la formule

$$m_*^c = \frac{n_f^2}{n_c\mathcal{K}} + m\frac{n_c - n_f}{n_c}. \quad (5.87)$$

Les masses effectives m_*^f et m_*^c se déduisent des relations (5.48). Les coefficients d'entraînement sont donc complètement déterminés par la seule donnée du scalaire de mobilité \mathcal{K} .

L'impulsion matérielle du superfluide de neutrons, μ_i^f est reliée à l'impulsion p_i dans le référentiel de l'écorce par une transformation de jauge du type (4.125)

$$\mu_i^f = p_i + m\gamma_{ij}v_c^j \quad (5.88)$$

ce qui en en accord avec la définition

$$\mu_i^f = \frac{\partial U}{\partial n_f^i} \quad (5.89)$$

et

$$p_i = \frac{\partial U\{v_c = 0\}}{\partial n^i}, \quad (5.90)$$

en remarquant que la densité d'énergie dynamique peut s'écrire avec $\rho = m(n_c + n_f)$, sous la forme

$$U_{\text{dyn}} = \frac{1}{2} \frac{m^f}{n_f} \gamma_{ij} n^i n^j + \frac{1}{2} \rho v_c^2 + m n^i v_c^j \gamma_{ij}. \quad (5.91)$$

L'équation (5.88) montre que l'impulsion μ_i^f du superfluide de neutrons est physiquement bien définie, dans le sens où elle est indépendante de la spécification des neutrons de conduction.

La description macroscopique étant achevée, il reste à évaluer le scalaire de mobilité \mathcal{K} par une étude microscopique de l'écorce interne.

Deuxième partie

Etude microscopique d'une étoile à neutrons

Chapitre 6

Physique nucléaire et étoile à neutrons

Sommaire

6.1	Introduction	137
6.2	Une hiérarchie d'approximations : du macroscopique au microscopique	138
6.3	Du problème à N corps à l'approximation du champ moyen .	142
6.4	Structure d'une étoile à neutrons	146

6.1 Introduction

Une étoile à neutrons, est comme son nom l'indique, constituée essentiellement de neutrons. Néanmoins la matière pure de neutrons est instable à pression nulle. C'est pourquoi, l'étoile est entourée d'une écorce solide, composée d'un cristal de noyaux de fer $^{56}_{26}\text{Fe}$ en surface, puis en sondant plus profondément, de noyaux de plus en plus éloignés de la ligne de stabilité β , c'est-à-dire des noyaux de plus en plus enrichis en neutrons, plongés dans un gaz homogène d'électrons ultrarelativistes. En raison des répulsions électromagnétiques, les noyaux sont formés d'un coeur de protons entouré d'une peau de neutrons de plus en plus diffuse à mesure que la densité augmente. A des densités de l'ordre de $4 \cdot 10^{11} \text{ g/cm}^3$, les halos de neutrons autour des noyaux sont si étendus que certains neutrons ne sont plus du tout liés aux noyaux. Cette densité marque la limite entre les régions externe et interne de l'écorce dans laquelle les noyaux baignent dans un gaz de neutrons « libres ». Les couches profondes de l'écorce sont marquées par la présence de noyaux fortement déformés. Lorsque la densité approche de la densité de saturation $\sim 10^{14} \text{ g/cm}^3$, les noyaux se dissolvent dans un mélange homogène de neutrons, protons et électrons.

L'intérieur d'une étoile à neutrons étend le domaine d'application de la physique nucléaire à des régimes de densités et de pressions qui sont inaccessibles dans les noyaux

ordinaires et en laboratoire. Ceci entraîne que les modèles ajustés sur les données expérimentales doivent nécessairement être extrapolés, bien au delà de leur domaine d'application. Il est donc indispensable d'avoir une compréhension microscopique approfondie de la matière nucléaire. Nous allons donner un aperçu des principales approches qui ont été adoptées en physique nucléaire, puis nous présenterons plus particulièrement le traitement de la matière nucléaire dans l'écorce d'une étoile à neutrons.

6.2 Une hiérarchie d'approximations : du macroscopique au microscopique

L'observation de la saturation des forces nucléaires a conduit à l'élaboration dans les années 1930 du modèle de la goutte liquide pour décrire le noyau. Dans un deuxième temps, la découverte de nombres magiques, c'est-à-dire de noyaux particulièrement stables, a donné naissance dans les années 1950 au modèle en couches selon lequel chaque nucléon se comporte comme une particule indépendante évoluant dans un potentiel moyen engendré par tous les autres. Ces deux approches ont été unifiées par le développement de méthodes microscopiques dans lesquelles le potentiel moyen est déduit d'interactions à deux et trois corps entre les nucléons.

6.2.1 Modèle de la goutte liquide

Les expériences de diffusion des noyaux par des électrons montrent que la densité au sein des noyaux lourds (contenant plus d'une dizaine de nucléons) est indépendante du nombre de nucléons et vaut environ

$$n_{\text{sat}} = 0.17 \text{ fm}^{-3}, \quad \rho_{\text{sat}} = 2.8 \times 10^{14} \text{ g.cm}^{-3}. \quad (6.1)$$

Ce phénomène de *saturation* traduit la présence d'une forte répulsion entre les nucléons à courte portée (voir par exemple Bethe & Bacher (1936)). Par ailleurs, l'existence même des noyaux indique que l'interaction nucléaire est attractive à plus longue distance. Les expériences de diffusion montrent que la densité décroît sur une distance de quelques fermis, qui est petite devant le rayon des noyaux. Le modèle le plus simple pour décrire un noyau, proposé par Gamow, consiste donc à l'assimiler à une goutte de liquide nucléaire *incompressible*, de forme sphérique de rayon R , contenant A nucléons dont Z protons et N neutrons. Puisque la densité est constante, celle-ci est donnée par

$$n_{\text{sat}} = \frac{A}{\left(\frac{4}{3}\pi R^3\right)}. \quad (6.2)$$

Le rayon de cette goutte est donc relié au nombre de nucléons par la formule

$$R = r_0 A^{1/3}, \quad r_0 = \left(\frac{4}{3}\pi n_{\text{sat}}\right)^{-1/3} \simeq 1.1 \text{ fm}. \quad (6.3)$$

La distance $2r_0 \simeq 2.2$ fm représente la distance moyenne entre deux nucléons dans le noyau. L'énergie de liaison $B\{A, Z\}$ d'un noyau, définie par la différence entre l'énergie totale du noyau $E\{A, Z\}$ (associée à la masse mesurée $M\{A, Z\}$ par la relation d'Einstein $E\{A, Z\} = M\{A, Z\}c^2$) et l'énergie de masse, s'exprime par une somme de plusieurs termes

$$B\{A, Z\} \equiv E\{A, Z\} - Zm_p c^2 - Nm_n c^2 = E_{\text{vol}} + E_{\text{surf}} + E_C. \quad (6.4)$$

Le premier terme donné par

$$E_{\text{vol}} = (b_{\text{vol}} + b_{\text{sym}}I^2)A, \quad (6.5)$$

en introduisant le paramètre d'asymétrie

$$I \equiv \frac{N - Z}{A}, \quad (6.6)$$

représente une contribution de volume de la matière nucléaire infinie, définie comme un fluide homogène de nucléons d'extension infinie dans lequel l'interaction électromagnétique est ignorée. Le coeur des noyaux lourds est supposé représenter un morceau de matière nucléaire infinie. Cette énergie de volume contient deux contributions : b_{vol} est l'énergie par nucléon de la matière nucléaire symétrique, et $b_{\text{sym}}I^2$ est une énergie par nucléon de symétrie d'isospin qui tend à favoriser les noyaux contenant autant de neutrons que de protons. L'énergie volumique E_{vol} traduit la saturation de la matière nucléaire puisque pour une composition en neutrons et protons fixée (I constant), l'énergie de liaison par nucléon $B\{A, Z\}/A$ est indépendante de A . Dans la limite de la matière infinie, $A \rightarrow +\infty$, $B\{A, Z\}/A = b_{\text{vol}}$. Le second terme E_{surf} est associé à des effets de taille finie, en particulier les effets de surface, donc est proportionnel au carré du rayon de la goutte

$$E_{\text{surf}} = b_{\text{surf}}A^{2/3} = \sigma 4\pi r_0^2 A^{2/3} \quad (6.7)$$

où σ s'interprète comme la tension superficielle du noyau. Enfin, E_C est l'énergie coulombienne du noyau qui s'exprime simplement par la formule (noyau sphérique uniformément chargé)

$$E_C = \frac{3}{5} \frac{Z^2 e^2}{r_0 A^{1/3}}. \quad (6.8)$$

Finalement, l'énergie de liaison s'exprime par la formule semi-empirique de masse de type Bethe-Weisäcker

$$B\{A, Z\} = b_{\text{vol}}A + b_{\text{surf}}A^{2/3} + b_{\text{sym}} \frac{(N - Z)^2}{A} + \frac{3}{5} \frac{Z^2 e^2}{r_0 A^{1/3}}. \quad (6.9)$$

Les paramètres de cette formule sont ajustés sur les énergies mesurées des noyaux terrestres. Des valeurs typiques de ces paramètres sont $b_{\text{vol}} \simeq -16$ MeV, $b_{\text{surf}} \simeq 17$ MeV, $b_{\text{sym}} \simeq 30$ MeV. La tension superficielle σ est de l'ordre du MeV/fm². Nous voyons ainsi par extrapolation que la matière pure de neutrons ($Z = 0 \Rightarrow A = N, I = 1$), dans la limite $N \rightarrow +\infty$, est instable puisque l'énergie de liaison par nucléon $B\{A, Z\}/A = (b_{\text{vol}} + b_{\text{sym}}) \simeq 14$ MeV est positive. Cette conclusion est confirmée par des études microscopiques perturbatives sur le problème à N corps. La matière nucléaire symétrique ($I = 0$) au contraire est liée $B\{A, Z\}/A = -16$ MeV.

6.2.2 Modèle de la goutte liquide compressible

Le modèle de la goutte liquide traité dans la section précédente, se généralise sous plusieurs aspects dont le plus important est de supposer que le noyau est *compressible*, c'est-à-dire en traitant la densité, non plus comme donnée par la densité de saturation (6.1) mais comme un paramètre. Un modèle plus réaliste doit également tenir compte de la peau de neutrons en considérant des rayons R_n et R_p distincts, des effets liés à la déformation des noyaux par rapport à une forme sphérique, ou encore des corrections à l'énergie coulombienne par rapport à l'expression (6.8) déduite de l'approximation d'une sphère uniformément chargée. Plus généralement, l'énergie de masse d'un noyau s'écrit sous la forme

$$B\{A, Z\} = \mathcal{E}\{n, x\}A + \sigma\{x\}\mathcal{A} + E_C, \quad (6.10)$$

dans laquelle $\mathcal{E}\{n, x\}$ est l'énergie par nucléon de la matière nucléaire infinie de densité n et de fraction protonique $x \equiv Z/A$, $\sigma\{x\}$ est la tension superficielle et \mathcal{A} l'aire de la surface du noyau. Au voisinage du point de saturation de la matière nucléaire symétrique infinie, caractérisé par $\{n = n_{\text{sat}}, x = 1/2\}$, l'énergie par nucléon admet un développement du type

$$\mathcal{E}\{n, x\} \simeq b_{\text{vol}} + b_{\text{sym}}(1 - 2x)^2 + \frac{1}{18}K_{\infty}(n - n_{\text{sat}})^2, \quad (6.11)$$

dans lequel K_{∞} représente le coefficient de compressibilité, qui peut être déduit des résonances géantes monopolaires des noyaux (modes de vibrations), $K_{\infty} \simeq 250$ MeV.

D'autres types de corrections, notamment celles associées à l'appariement des nucléons et à l'effet Wigner (surstabilité des noyaux symétriques qui est prise en compte par une contribution du type $E_W = V_W \exp\{-\lambda|N - Z|/A\} < 0$), sont introduites dans la formule précédente de façon à reproduire plus précisément les masses des noyaux. Pour une revue récente sur le sujet et une analyse détaillée de ces corrections, le lecteur est encouragé à consulter la référence Lunney *et al.* (2003).

6.2.3 Modèle de particules indépendantes

La mesure systématique des énergies de liaison des noyaux a permis de mettre en évidence l'existence de noyaux très stables caractérisés par un nombre de neutrons ou de protons dans la liste 8, 20, 28, 50, 82 et 126. Ces nombres magiques s'interprètent comme une manifestation d'effets de couches, analogues à ceux observés dans les atomes dont les niveaux électroniques sont complètement remplis. Cela suggère que les nucléons à l'intérieur du noyau se comportent comme des particules indépendantes évoluant dans un potentiel attractif. Néanmoins à la différence des électrons d'un atome, il n'existe pas d'équivalent pour les nucléons dans un noyau, au potentiel central coulombien. Dans le cas du noyau, le potentiel central est engendré par les nucléons eux-mêmes (dans un atome, le potentiel central contient aussi une contribution de l'ensemble des électrons qui s'ajoute au potentiel coulombien). Il est possible de déduire la forme générale de ce potentiel moyen par quelques considérations simples. Tout d'abord, puisque les nucléons dans le noyau

sont liés, ce potentiel, disons $V\{r\}$, est nécessairement attractif

$$\frac{\partial V}{\partial r} \geq 0. \quad (6.12)$$

Ensuite les forces nucléaires sont de portée finie, ce qui implique que le potentiel doit tendre vers une valeur constante, que nous choisissons comme origine des énergies, au delà d'un certain rayon R , de l'ordre du rayon de la goutte liquide :

$$V\{r > R\} \simeq 0. \quad (6.13)$$

Enfin, par symétrie, un nucléon au centre du noyau ne subit aucune force d'où

$$\left. \frac{\partial V}{\partial r} \right|_{r=0} = 0. \quad (6.14)$$

Le potentiel moyen a donc typiquement la forme du potentiel de Woods-Saxon défini par ¹

$$V\{r\} = -V_0 \left(1 + \exp \left\{ \frac{r - R}{\xi} \right\} \right)^{-1}. \quad (6.15)$$

La profondeur V_0 du puits est typiquement de l'ordre de 50 MeV et $\xi \simeq 0.5$ fm (les paramètres sont en général différents pour les protons et les neutrons). Dans le modèle en couche, le noyau a une surface diffuse contrairement aux modèles de gouttes liquides. Ceci traduit le fait que la densité de nucléons n'est pas uniforme à l'intérieur du noyau mais dépend de la distance r au centre. A ce potentiel central s'ajoute le potentiel coulombien pour les protons, qui pour une sphère uniformément chargée est donné par

$$V_C\{r\} = \begin{cases} \frac{Ze^2}{R} \frac{1}{2} \left(3 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right) & r \leq R \\ \frac{Ze^2}{R} & r > R. \end{cases} \quad (6.16)$$

Pour obtenir la séquence correcte des nombres magiques, il est nécessaire d'introduire un terme de couplage spin-orbit, qui provient essentiellement des interactions nucléaires (le terme de correction issu d'un traitement relativiste est environ un ordre de grandeur plus petit). Ce potentiel est de la forme

$$V_{LS}\{r\} = \lambda \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{1} \cdot \mathbf{s}, \quad (6.17)$$

avec $\lambda \simeq -0.5$ fm². Il est important de souligner que le couplage spin-orbit est un effet de surface.

Chaque nucléon de masse m , est donc décrit par une fonction d'onde φ , qui satisfait une équation de Schrödinger du type

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi\{\mathbf{r}\} + U\{\mathbf{r}\} \varphi\{\mathbf{r}\} = \mathcal{E} \varphi\{\mathbf{r}\}, \quad (6.18)$$

¹La force induite au centre du noyau n'est pas rigoureusement nulle mais est négligeable devant la force à la surface du noyau.

avec les conditions aux limites que la fonction d'onde s'annule à l'infini (U désigne la somme des potentiels central, spin-orbit et pour les protons du potentiel coulombien). Les solutions de cette équation différentielle sont associées à des énergies discrètes \mathcal{E}_α . L'énergie du noyau dans l'état fondamental est alors simplement la somme des énergies individuelles

$$E\{A, Z\} = \sum_{\alpha=1}^A \mathcal{E}_\alpha. \quad (6.19)$$

En général, cette énergie n'est pas une très bonne estimation de l'énergie mesurée du noyau. Le modèle en couches est complémentaire du modèle de la goutte liquide, en ce sens qu'il permet de reproduire les propriétés des noyaux dans lesquelles seuls n'interviennent que *quelques* nucléons dans la dernière couche occupée. Il est possible de réconcilier ces deux approches par des procédures de types Strutinski, selon laquelle la correction à l'énergie de la goutte liquide est simplement la contribution oscillante (par rapport au nombre de nucléons) de l'énergie du modèle en couches (pour une discussion de cette méthode, voir par exemple Ring & Schuck (1980)). Cette méthode demeure néanmoins phénoménologique. Par ailleurs, le modèle de particules indépendantes est pour l'instant restreint à la description des noyaux proches des nombres magiques. Une compréhension plus approfondie du noyau, et l'extrapolation aux noyaux exotiques tels que ceux rencontrés dans l'écorce d'une étoile à neutrons nécessitent un traitement plus microscopique.

6.3 Du problème à N corps à l'approximation du champ moyen

6.3.1 Interaction nucléon-nucléon et effets de milieu

Un traitement microscopique de la matière nucléaire repose uniquement sur la connaissance de l'interaction entre les nucléons. Nous avons déjà souligné l'analogie entre les nucléons dans le noyau et les électrons dans un atome, notamment par l'existence de nombres magiques. Néanmoins, il existe une différence importante entre les deux systèmes : contrairement au cas des électrons, l'interaction entre nucléons est mal connue. Les nucléons ne sont pas des particules élémentaires mais sont formés de quarks. L'interaction entre nucléons devrait donc pouvoir théoriquement être déduite des interactions entre quarks et gluons au sein de la chromodynamique quantique. Or pour l'instant, la complexité de cette théorie, notamment son caractère non perturbatif à basse énergie, rend cette tâche extrêmement difficile.

Bien avant la découverte des quarks, Yukawa suggérait dès 1935, par analogie avec l'électrodynamique quantique, que les interactions nucléaires étaient portées par l'échange de pions π . A la différence des photons qui engendrent les forces électromagnétiques, les pions sont des particules massives (énergie de masse $m_\pi c^2 = 138$ MeV) du fait de la portée finie des forces nucléaires. L'échange de pions explique la partie attractive à longue portée (> 2 fm) des interactions nucléaires. En s'appuyant sur les symétries supposées des

forces nucléaires (voir par exemple Ring & Schuck (1980)), des potentiels d'interaction nucléon-nucléon phénoménologiques, contenant un vingtaine d'opérateurs, ont été développés depuis les années 1950-60 pour décrire la partie à moyenne et longue portée des interactions (*OPEP=One Pion Exchange Potential*). Les paramètres (environ une cinquantaine) sont ajustés sur les données expérimentales, notamment les déphasages des collisions nucléon-nucléon (actuellement environ 4000 données d'expériences) sous le seuil de production du pion (au delà d'une énergie de faisceau de l'ordre de ~ 350 MeV, des effets d'inélasticités liés à la production de particules se manifestent et ne peuvent être correctement décrits par un simple potentiel) et les données du deutéron, seul noyau stable formé de deux nucléons ¹.

Typiquement la dépendance radiale de ces potentiels présente une asymptote en $+\infty$ lorsque la distance de séparation entre les nucléons approche de $r_c \simeq 0.4$ fm. L'existence de ce coeur dur de taille r_c , à l'origine du phénomène de saturation, rend un développement perturbatif dans l'interaction complètement inadapté et nécessite un traitement particulier. Une théorie a été développée à cet effet principalement par Brueckner dans le milieu des années 1950, puis par Goldstone et Bethe (pour un exposé de cette méthode voir par exemple le livre de Fetter & Walecka (1971) et les différentes revues Day (1967), Rajaraman & Bethe (1967), Brandow (1967), Bethe (1971)). Brueckner & Gammel (1958) réalisèrent le premier calcul numérique avec cette théorie en 1958. Très schématiquement, elle consiste à déduire une interaction *effective* entre les nucléons en étudiant les effets du milieu nucléaire sur une paire. Le coeur de cette interaction effective est en général beaucoup plus doux que l'interaction entre deux nucléons isolés. Les nucléons peuvent alors être décrits comme des particules indépendantes dans l'approximation Hartree-Fock. Une autre approche, dite variationnelle, consiste à rechercher des solutions dans un sous-espace seulement de l'espace des états, en exprimant la fonction d'onde sous une forme paramétrée qui inclut explicitement des corrélations (voir par exemple Wiringa (1993)).

Il s'est avéré nécessaire pour reproduire au mieux les données, de construire des potentiels en s'affranchissant de certaines symétries, notamment l'invariance de charge (symétrie entre neutrons et protons qui a donné naissance à la notion d'isospin par analogie avec le spin). Les paramétrisations récentes sont celles du groupe d'Argonne (AV18) et d'Urbana (UV18).

Des potentiels réalistes, fondés sur la théorie de l'échange non seulement de pions mais également d'autres mésons plus massifs découverts dans les années 1960, ont été développés avec succès dans les années 1970 et sont aujourd'hui rassemblés sous l'acronyme *OBEP*, pour *One Boson Exchange Potential*. Des mésons, comme le σ , le ρ ou l' ω sont à l'origine de l'interaction à moyenne et courte portée². Seul le coeur dur est en général paramétré de façon plus phénoménologique. Les paramètres des mésons sont ajustés sur les propriétés mesurées des mésons et sur les diffusions nucléon-nucléon. Les potentiels récents portent des noms de villes dans lesquelles ils ont été développés, comme Bonn, Paris et Nimègue (Nijmegen).

¹Le deutéron est le nom donné au noyau du deutérium, formé d'un neutron et d'un proton.

²La portée d'un méson est donnée en fonction de sa masse m par \hbar/mc .

Des progrès récents ont été accomplis dans la recherche plus microscopique de potentiels nucléon-nucléon, par l'introduction du concept de théorie effective des champs, initié notamment par les travaux de Weinberg (1979, 1996). Cette notion a été appliquée à la chromodynamique quantique de basse énergie (à une échelle d'énergie inférieure à $\Lambda_\chi \sim 1$ GeV), et a donné naissance à la théorie de perturbation chirale désignée par l'acronyme χ PT, dans laquelle les champs effectifs ne sont pas les quarks et les gluons, mais les nucléons et les mésons. Cette théorie permet de déduire de façon cohérente, à chaque ordre de perturbation, les interactions à deux et trois corps. Des potentiels nucléon-nucléon réalistes, d'une précision comparable aux potentiels phénoménologiques, ont ainsi été récemment obtenus par Entem & Machleidt (2003). Dans le cadre de cette théorie, il a également été possible de montrer que les interactions à quatre corps et plus sont négligeables (voir van Kolck (1994)). Pour une revue récente sur l'interaction nucléon-nucléon, voir par exemple Machleidt & Slaus (2001).

Une théorie microscopique de la matière nucléaire doit présenter un point d'équilibre stable pour la matière infinie symétrique à la densité de saturation $n_{\text{sat}} = 0.17 \text{ fm}^{-3}$ (existence des noyaux!) avec une énergie de liaison par nucléon $\mathcal{E}\{n_{\text{sat}}, x = 1/2\} \simeq -16$ MeV environ. Coester *et al.* (1970) ont été parmi les premiers à remarquer que les points de saturation obtenus par la théorie de Brueckner dans l'approximation Hartree-Fock de particules indépendantes (BHF) avec différents potentiels nucléon-nucléon réalistes s'étalent sur une bande éponyme qui ne recouvre pas le point de saturation expérimental. Autrement dit, un potentiel qui reproduit correctement l'énergie de liaison par nucléon de la matière nucléaire, fournit une densité de saturation trop grande et vice versa. Ce type de comportement a également été observé dans les noyaux (voir Kümmel *et al.* (1978), Müther (1985), Schmid *et al.* (1991)) (les calculs Brueckner-Hartree-Fock ne parviennent pas à reproduire à la fois l'énergie de liaison et le rayon de charge). La situation s'améliore avec l'introduction d'interactions à trois corps empiriques, ajustées notamment sur les propriétés des noyaux du tritium et de l'hélium 3.

L'extension relativiste de la méthode de Brueckner (théorie de Dirac-Brueckner, voir Machleidt (1989), Fuchs (2004)) permet de retrouver le point de saturation de la matière nucléaire infinie symétrique (voir par exemple Brockmann & Machleidt (1984)). Néanmoins, tout comme pour la théorie non relativiste, les résultats sur les noyaux ne sont pas encore complètement satisfaisants (voir par exemple Fritz *et al.* (1993)).

6.3.2 Interaction nucléon-nucléon effective et champ moyen

Une approche moins fondamentale consiste à supposer une interaction nucléon-nucléon *effective*, dépendant d'un petit nombre de paramètres ajustés pour reproduire *directement* certaines propriétés des noyaux. La méthode de champ moyen relativiste dans l'approximation de Hartree (ou hadrodynamique quantique) a été proposée par Walecka (1974). Les nucléons sont traités comme des particules indépendantes et sont décrits par une équation de Dirac avec un champ moyen résultant de l'échange de mésons. Dans le modèle de Walecka, seuls deux mésons intermédiaires étaient considérés : le méson scalaire σ (équivalent à l'échange de deux pions) représentant la partie attractive à moyenne dis-

tance de l'interaction entre nucléons, et le méson vecteur ω associé à la partie répulsive à courte distance de l'interaction entre nucléons. Depuis, ce modèle a été amélioré en ajoutant d'autres mésons et d'autres types de couplages, notamment le méson ρ pour traiter la matière nucléaire asymétrique. Contrairement à la méthode de Dirac-Bruecker, les paramètres des mésons (leur masse et les constantes de couplages) sont directement ajustés sur les propriétés des noyaux (pour l'application de cette méthode dans le contexte des étoiles à neutrons, voir Glendenning (1997)). Les termes d'échange dans le calcul du champ moyen sont supposés être absorbés dans les constantes de couplage effectives et sont donc habituellement négligés. De plus la contribution des antiparticules à la densité de nucléons est également ignorée en général.

Parallèlement, des interactions effectives phénoménologiques à deux corps ont été développées dans les années 1960 pour les calculs de champs moyens non relativistes dans les noyaux. Un progrès majeur a été réalisé dans la décennie suivante par les travaux notamment de Vautherin & Brink (1972), en introduisant une interaction effective de contact mais qui dépend de la densité. Ils ont également mis en évidence les relations entre les paramètres de l'interaction effective et les propriétés des noyaux et de la matière nucléaire infinie. Negele & Vautherin (1972) ont montré comment déduire ce type d'interaction de calculs microscopiques. Peu de temps après, des forces effectives de portées finies dépendant de la densité ont été développées par Gogny (1975). Les forces les plus couramment utilisées sont les paramétrisations de Skyrme (1956, 1959) de portée nulle et celles de Gogny de portée finie. Des forces effectives ont été développées spécifiquement pour traiter la matière nucléaire dans les étoiles neutrons, notamment en ajustant les paramètres non seulement sur les données expérimentales mais également sur les calculs microscopiques de la matière pure de neutrons. Citons entre autre les forces de Skyrme obtenues par le groupe de l'Institut de Physique Nucléaire de Lyon (voir Chabanat *et al.* (1997, 1998a, 1998b)) qui sont très utilisées, et la paramétrisation D1P des forces de Gogny (voir Farine *et al.* (1999)).

Dans l'approximation Hartree-Fock, les nucléons sont décrits comme des particules indépendantes plongées dans un champ moyen résultant des interactions nucléon-nucléon effectives. Les équations Hartree-Fock prennent la forme d'équations de type Schrödinger dans lesquelles le potentiel dépend des fonctions d'ondes des nucléons. Ces équations ne sont donc pas simplement des équations aux valeurs propres. Elles sont habituellement résolues de façon itérative. Le potentiel moyen est en général non local pour des interactions de portée finie, comme par exemple pour les forces de Gogny. Des forces de contact de type Skyrme sont donc numériquement très avantageuses. Dans ce cas, les effets liés à la non localité (donc à la portée finie des forces nucléaires) sont représentés par une dépendance en impulsion de l'interaction effective qui se traduit par une redéfinition de la masse m d'un nucléon en une masse $m^\oplus\{\mathbf{r}\}$ qui varie spatialement à travers les densités locales de neutrons et de protons. Nous traiterons plus en détail la méthode Hartree-Fock dans le chapitre 8.

Une façon d'améliorer cette méthode est de considérer non plus des particules indépendantes mais des « quasiparticules » indépendantes. Les équations obtenues portent le nom de Hartree-Fock-Bogoliubov (Bogoliubov-de Gennes en matière condensée). Cette

méthode permet de traiter les effets d'appariement qui sont importants dans les noyaux et qui donnent lieu aux phénomènes de superfluidité dans les étoiles à neutrons (pour une présentation des avancées récentes sur les méthodes de champs moyens, voir Bender *et al.* (2003)). Une forme approchée de ces équations est la méthode BCS, qui consiste à supposer que seuls certains états sont couplés par les effets d'appariement, ce qui nécessite une connaissance préalable des états d'une paire. Pour un système invariant par renversement du temps, le choix naturel est de considérer les deux états conjugués issus de la dégénérescence de Kramers.

6.3.3 Approximations semi-classiques

La résolution des équations de champs moyens peut être numériquement assez lourde, notamment lorsque le nombre de nucléons est important. C'est pourquoi des méthodes semi-classiques ont été développées. D'après le théorème de Hohenberg & Kohn (1964), l'énergie dans l'état fondamental est une fonctionnelle unique de la densité. De plus l'énergie atteint un minimum pour la densité de l'état fondamental avec la contrainte que le nombre de particules est fixé. Si nous connaissions cette fonctionnelle de la densité, nous pourrions donc en déduire l'énergie de l'état fondamental par minimisation. Malheureusement, en général nous ne connaissons pas la forme exacte de cette fonctionnelle de la densité. Néanmoins, nous pouvons obtenir une forme approchée. L'approximation la plus simple, la méthode de Thomas-Fermi développée à l'origine pour traiter le cas des électrons dans un atome, consiste à supposer que localement les particules évoluent comme dans un milieu homogène. Cette méthode a été améliorée plus récemment dans le contexte nucléaire et est connue sous le nom de méthode de Thomas-Fermi étendue (voir par exemple Brack *et al.* (1985)).

6.4 Structure d'une étoile à neutrons

6.4.1 Matière froide catalysée

Les températures qui règnent au sein d'une étoile à neutrons juste après sa formation dans l'explosion d'une supernova, sont supposées être gigantesques, de plusieurs centaines de milliards de degrés Kelvin (une dizaine de MeV). À de telles températures, la matière peut être considérée en équilibre thermodynamique : c'est l'hypothèse de matière catalysée. L'étoile se refroidit rapidement, en libérant de l'énergie sous forme de neutrinos et de photons. La température interne chute à environ 10^8 K (soit environ une centaine de keV) après quelques années seulement. En dépit de ces températures élevées en regard des températures que nous rencontrons sur Terre, l'énergie thermique associée est négligeable devant les énergies d'agitation quantique des différentes particules, excepté en surface et dans les couches les plus externes. De ce point de vue, une étoile à neutrons est donc un astre essentiellement froid et la température interne peut être considérée comme nulle. L'hypothèse principale dans l'étude de la structure d'une étoile à neutrons est de supposer que l'étoile a atteint son état d'équilibre le plus stable, c'est-à-dire de plus basse énergie :

c'est selon l'expression de Harrison *et al.* (1965) un état de « matière froide catalysée au point final de l'évolution thermonucléaire ».

La structure d'une étoile à neutrons a été étudiée bien avant la découverte des pulsars et l'existence d'une écorce solide plongée dans un gaz de neutrons libres a été prédite dès la fin des années 1960 sur la base d'une formule semi-empirique de masse.

6.4.2 Description de l'écorce d'une étoile à neutrons

Les méthodes du problème à N corps avec pour seule donnée l'interaction nucléon-nucléon nue, ne sont pour l'instant pas envisageables dans l'étude de la structure de l'écorce d'une étoile à neutrons, notamment en raison de la complexité introduite par la présence d'inhomogénéités et du grand nombre de nucléons par noyau. Les calculs de ce type sont donc essentiellement restreints à l'étude de la matière nucléaire uniforme infinie. C'est pourquoi, les calculs les plus réalistes de l'écorce reposent sur des approximations de champs moyens avec des interactions nucléon-nucléon effectives phénoménologiques.

D'un autre côté, le modèle de la goutte liquide a été largement utilisé pour étudier la structure d'une étoile à neutrons et l'équation d'états depuis les premiers calculs de Harrison et Wheeler en 1958 avec une formule semi empirique pour calculer la masse des noyaux qui composent l'écorce. Cette approche simplifiée présente l'intérêt de pouvoir étudier séparément les différentes contributions à l'énergie et notamment de jauger leur importance relative. Le modèle de la goutte liquide a été originellement développé pour décrire un noyau dans un atome isolé. Au contraire, l'écorce d'une étoile à neutrons est formé d'un cristal de noyaux immergé dans un gaz homogène d'électrons ultra relativistes. De plus dans l'écorce interne, les noyaux baignent dans un superfluide de neutrons. Il est donc nécessaire d'adapter le modèle de la goutte liquide pour décrire la matière nucléaire dans une étoile à neutrons.

6.4.3 Ecorce externe

Considérons tout d'abord l'écorce externe. Au début des années 1960, Salpeter améliorerait le modèle de Harrison et Wheeler en tenant compte des effets de couches, qui favorisent les noyaux avec des nombres magiques. Un progrès important fut réalisé par Baym *et al.* (1971b). Ils employèrent la formule de masse de Myers & Swiatecki (1966), qui améliorerait sensiblement la précision des formules précédentes, et montrèrent que l'énergie coulombienne entre les électrons et les noyaux jouait un rôle important dans la détermination de la composition de ces derniers. Plus récemment, Haensel & Pichon (1994) ont montré que la structure et la composition de l'écorce externe pouvait être entièrement déterminée par les masses des noyaux mesurées expérimentalement jusqu'à une densité de l'ordre de $10^{11} \text{ g.cm}^{-3}$, proche de la transition avec l'écorce interne.

Dans un modèle de goutte liquide, la densité d'énergie totale s'exprime sous la forme

$$\varepsilon_{\text{tot}} = n_N E\{A, Z\} + \varepsilon_e, \quad (6.20)$$

où n_N est la densité de noyaux et $E\{A, Z\}$ l'énergie d'un noyau, ε_e la densité d'énergie du gaz d'électrons. En général le terme d'interactions électron-électron est contenu dans l'énergie d'un noyau de telle sorte que la densité d'énergie électronique est purement cinétique et est donnée pour un gaz uniforme relativiste par

$$\varepsilon_e = \frac{m_e^4 c^5}{8\pi^2 \hbar^3} \left(x_e (2x_e^2 + 1) \sqrt{x_e^2 + 1} - \ln\{x_e + \sqrt{x_e^2 + 1}\} \right), \quad (6.21)$$

avec $x_e = (3\pi^2 n_e)^{1/3} \hbar / m_e c$.

L'énergie d'un noyau est donnée par une expressions du type (6.10), dans laquelle l'énergie coulombienne est modifiée du fait que le noyau n'est pas isolé mais appartient à un réseau cristallin, et aussi du fait que les électrons n'ont pas la même distribution que dans un atome. L'énergie coulombienne est habituellement calculée dans l'approximation de Wigner-Seitz, qui revient à supposer que la matière est formée d'un ensemble de sphères électriquement neutres dont le volume $\mathcal{V}_{\text{cell}}$ est égal au volume occupé par un noyau dont la densité est n_N , donc $\mathcal{V}_{\text{cell}} = 1/n_N$. Puisque une cellule est neutre, elle contient autant de protons que d'électrons, et les interactions entre des électrons et des noyaux de différentes cellules sont négligeables. L'énergie coulombienne par noyau est alors approximativement donnée par l'énergie d'une seule sphère. A l'énergie coulombienne $E_C^{(0)}$ d'une sphère uniformément chargée,

$$E_C^{(0)} = \frac{3}{5} \frac{Z^2 e^2}{R}, \quad (6.22)$$

s'ajoute la contribution propre au réseau,

$$\delta E_C = -\frac{9}{10} \frac{Z^2 e^2}{R_{\text{cell}}} \left(1 - \frac{5}{9} \frac{\langle r^2 \rangle}{R_{\text{cell}}^2} \right), \quad (6.23)$$

R_{cell} désignant le rayon de la sphère de volume $\mathcal{V}_{\text{cell}}$. Le premier terme est la somme des interactions électrons-électrons et électrons-noyaux en supposant que le noyau est ponctuel. L'énergie obtenue dans l'approximation de W-S, notamment le facteur 9/10 est en bon accord avec celui obtenu par un calcul exact, 0.89593, 0.89588 et 0.88006 pour un réseau respectivement cubique centré, cubique à faces centrées et cubique simple. Le second terme est la correction de taille finie des noyaux dans laquelle $\langle r^2 \rangle$ représente le rayon carré moyen de charge, qui pour une distribution uniforme est donné par

$$\langle r^2 \rangle = \frac{3}{5} R^2. \quad (6.24)$$

L'énergie coulombienne totale par noyau est donc finalement

$$E_C = E_C^{(0)} + \delta E_C = E_C^{(0)} \left(1 - \frac{3}{2} \frac{R}{R_{\text{cell}}} + \frac{1}{2} \left(\frac{R}{R_{\text{cell}}} \right)^3 \right). \quad (6.25)$$

Pour le calcul détaillé des termes de corrections, le lecteur pourra consulter par exemple l'article de Mackie & Baym (1977) et les références citées.

La configuration d'équilibre est celle qui minimise la densité d'énergie totale (6.20) par rapport à tous les paramètres introduits dans le modèle. En particulier, la condition d'équilibre par rapport au rayon du noyau R s'exprime simplement par le théorème du viriel (voir Baym *et al.* (1971a))

$$E_{\text{surf}} = 2E_C, \quad (6.26)$$

en supposant que l'énergie de surface est proportionnelle à R^2 et que l'énergie coulombienne varie seulement comme $1/R$. Nous voyons ainsi que la taille des noyaux résulte d'un compromis entre énergie de surface et énergie coulombienne. Ce théorème montre également que la composition et la forme des noyaux à l'équilibre sont particulièrement sensibles à l'énergie de surface et à l'énergie coulombienne. Ainsi, la correction (6.23) à l'énergie coulombienne, qui représente environ 15% de l'énergie coulombienne totale à une densité de l'ordre de 10^{11} g/cm³, joue un rôle important dans la détermination de la structure de l'écorce. Nous pouvons d'ores et déjà appliquer ce théorème du viriel pour les noyaux ordinaires. D'après le modèle de la goutte liquide incompressible, nous avons $E_{\text{surf}} = b_{\text{surf}} A^{2/3} \simeq 17 A^{2/3}$ MeV et $E_C \simeq 0.7 Z^2 / A^{1/3}$ MeV. La condition d'équilibre (6.26) fournit alors pour le nombre de nucléons $A \simeq 12/x^2$, c'est-à-dire pour la matière symétrique $x = 1/2$, $A \simeq 48$. Cette estimation est en assez bon accord avec le fait que les noyaux proches du fer ${}^{56}_{26}\text{Fe}$ sont les plus stables.

6.4.4 Ecorce interne

La plupart des noyaux dans l'écorce externe existent sur Terre ou peuvent être obtenus en laboratoire. Par conséquent leur masse peut être directement mesurée. En revanche, La situation est radicalement différente dans l'écorce interne du fait que les noyaux sont plongés dans un gaz de neutrons qui exercent une pression sur les noyaux. Il est alors nécessaire d'extrapoler la masse des noyaux à partir des données sur les noyaux connus, notamment les noyaux fortement enrichis en neutrons.

Dans le modèle de Harrison et Wheeler de 1958, les neutrons étaient traités comme un gaz de Fermi sans interaction et les noyaux par une formule semi-empirique de masse. Des travaux ultérieurs ont amélioré cette description, notamment en ce qui concerne le gaz de neutrons (voir Langer *et al.* (1969), Bethe *et al.* (1970)). A partir des années 1970, des modèles ont été développés pour traiter de façon cohérente le gaz de neutrons et les nucléons dans les noyaux en s'appuyant pour cela sur une même expression de la densité d'énergie $\varepsilon\{n, x\}$ de la matière nucléaire asymétrique, de densité baryonique n et de fraction protonique x . Citons en particulier le travail de Baym *et al.* (1971a) qui prirent notamment en compte la réduction de l'énergie de surface induite par la présence du gaz de neutrons. Dans le même temps, sont apparues des approches plus microscopiques fondées sur l'approximation Thomas-Fermi (voir Buchler & Barkat (1971), Barkat *et al.* (1972), Arponen (1972)).

Negele et Vautherin ont effectué un travail pionnier en 1973, en calculant l'état fondamental de l'écorce interne dans l'approximation Hartree-Fock, que nous discuterons au chapitre 8, d'après une fonctionnelle de la densité d'énergie s'appuyant sur un développement des matrices densités (voir Negele & Vautherin (1972)). Tandis que la littérature sur

la superfluidité de la matière nucléaire homogène est très vaste (voir par exemple la revue de Dean & Hjorth-Jensen (2003)), peu d'études ont été consacrées à la superfluidité dans la matière inhomogène et notamment à l'effet de l'appariement des nucléons sur la structure de l'écorce. Barranco *et al.* (1998) ont effectué un calcul Hartree-Fock-Bogoliubov, en fixant le champ moyen sous la forme d'une fonction paramétrée de type Woods-Saxon avec une force de Gogny pour l'appariement. Plus récemment, les corrections liées à l'appariement des nucléons ont été prises en comptes, d'abord dans l'approximation BCS par Montani *et al.* (2004), puis dernièrement dans un calcul Hartree-Fock Bogoliubov complètement autocohérent par Sandulescu *et al.* (2004) en employant dans les deux cas des interactions effectives de contact pour le canal particule-trou (des forces de Skyrme respectivement SI et SLy4) et le canal particule-particule pour l'appariement. Magierski & Heenen (2002) ont effectué un calcul Hartree-Fock avec une interaction effective de type Skyrme (SLy4) avec des conditions aux limites périodiques, contrairement aux calculs précédents basés sur l'approximation de Wigner-Seitz qui consiste à traiter les noyaux de l'écorce comme s'ils étaient isolés. Néanmoins nous verrons au chapitre suivant qu'aucune de ces deux approches n'est satisfaisante et qu'il est nécessaire de reconsidérer de façon plus rigoureuse la question des conditions aux limites.

Dans l'approche de la goutte liquide, l'énergie d'une cellule s'écrit alors sous la forme

$$E_{\text{cell}} = \varepsilon\{n_i, x_i\}\mathcal{V}_{\text{nuc}} + \varepsilon\{n_o, 0\}(\mathcal{V}_{\text{cell}} - \mathcal{V}_{\text{nuc}}) + \sigma\{x\}\mathcal{A} + E_C, \quad (6.27)$$

où n_i et x_i sont respectivement la densité de nucléons et la fraction protonique à l'intérieur des noyaux de volume \mathcal{V}_{nuc} , et n_o la densité du gaz de neutrons. Il est important de remarquer que dans cette approche les neutrons à l'extérieur et à l'intérieur des noyaux sont traités comme des phases distinctes, respectivement gazeuse et liquide. La présence du gaz de neutrons réduit la tension superficielle et influence par conséquent, de façon significative la composition des noyaux.

6.4.5 Phases exotiques

C'est sur la base du modèle de la goutte liquide compressible, dans le contexte de l'effondrement d'étoiles en supernovae, que Ravenhall *et al.* (1983) ont suggéré l'existence de noyaux fortement déformés, adoptant des formes pour le moins surprenantes comme des noyaux tubulaires, dans les couches les plus profondes de l'écorce interne. La déformation des noyaux est liée à l'instabilité des noyaux sphériques vis-à-vis de la fission lorsque la condition de Bohr & Wheeler (1939)

$$E_C^{(0)} \geq 2E_{\text{surf}}, \quad (6.28)$$

est satisfaite. Cette condition a été obtenue en supposant un noyau isolé. Néanmoins les corrections induites par la présence des autres noyaux dans l'écorce sont seulement de l'ordre de $(R/R_{\text{cell}})^3$ (voir Brandt (1985)). Cette condition associée au théorème de viriel (6.26), montre que les noyaux non sphériques apparaissent lorsque les noyaux occupent environ 1/8 de l'espace ($R/R_{\text{cell}} \geq 1/2 \Rightarrow \mathcal{V}_{\text{nuc}}/\mathcal{V}_{\text{cell}} \geq 1/8$). Les calculs de Ravenhall

et al. (1983) indiquaient que la transition vers la matière nucléaire homogène du manteau s'accompagnait d'une séquence de phases exotiques. Par densité croissante, l'écorce serait ainsi composée d'une phase de noyaux sphériques, suivie de noyaux en formes de tubes baptisés « spaghettis », puis une phase « lasagnes » de noyaux complètement aplatis.

A des densités plus grandes, lorsque la fraction de volume occupé par les noyaux atteint $\mathcal{V}_{\text{nuc}}/\mathcal{V}_{\text{cell}} \simeq 1/2$, il apparaît une série de phases inversées, c'est-à-dire de bulles dans de la matière nucléaire homogène, déjà prédites plusieurs années auparavant par Baym *et al.* (1971a) : une phase « antispaghettis » de bulles cylindriques puis une phase de bulles sphériques. Ces résultats furent confirmés peu de temps après par Hashimoto *et al.* (1984) sur des arguments essentiellement géométriques. Ils montrèrent en particulier que les noyaux ou les bulles sphériques sont disposés selon un réseau cubique centré, et que leurs homologues cylindriques selon un réseau hexagonal bidimensionnel (voir Oyamatsu *et al.* (1984)). Des calculs basés sur l'approximation de Thomas-Fermi, menèrent à la même conclusion (voir Williams & Koonin (1985), Lassaut *et al.* (1987)). Lorenz *et al.* (1993) étudièrent les différentes phases exotiques à l'équilibre avec un modèle de goutte liquide compressible dont les paramètres furent calculés avec deux interactions nucléon-nucléon effectives phénoménologiques de type Skyrme différentes : l'interaction FPS d'une part, ajustée sur l'équation d'état de Friedman & Pandharipande (1981) pour la matière nucléaire symétrique et la matière pure de neutrons, et l'interaction SkM (voir Krivine *et al.* (1980)) d'autre part. Dans le premier cas, ils retrouvèrent la séquence des noyaux déformés mais dans l'autre cas, les configurations d'équilibres ne laissaient jamais apparaître des phases exotiques. Ils montrèrent que cette différence provenait d'une différence dans l'ajustement de l'interaction SkM sur les propriétés de la matière pure de neutrons (voir Pethick *et al.* (1995)). Ceci illustre la nécessité d'avoir une meilleure compréhension de la matière nucléaire dans des régimes de densité, de pression et de fraction protonique très différents de la matière nucléaire rencontrée dans les noyaux ordinaires. Oyamatsu (1993) réalisa un calcul Thomas-Fermi avec une densité d'énergie ajustée sur l'équation d'état de Friedman & Pandharipande (1981) et une forme paramétrée des densités et retrouva également la même séquence de phases exotiques. Magierski *et al.* (2002, 2003) ont récemment étudié la forme des noyaux dans l'approximation Skyrme-Hartree-Fock et ont montré que dans certains cas, la forme sphérique n'était pas la forme d'équilibre. La formation de phases exotiques a également été observée par Watanabe *et al.* (2003) dans des simulations dynamiques. Signalons que certains modèles ne prédisent pas l'apparition de ces phases de « pâtes » nucléaires, comme le modèle de goutte liquide compressible de Douchin & Haensel (2000) basé sur une interaction effective de Skyrme (SLy4) et le modèle Thomas-Fermi de la théorie des champs moyens relativistes de Cheng *et al.* (1997).

Les phases exotiques représentent environ la moitié de toute la masse de l'écorce (voir Lorenz *et al.* (1993)). La présence de noyaux déformés pourrait jouer un rôle important dans l'émission de neutrinos et donc dans le refroidissement d'une étoile à neutrons. Par exemple, il a récemment été suggéré par Gusakov *et al.* (2004) que l'existence d'une phase de bulles de neutrons pourrait déclencher des réactions de type URCA directes ($n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$ suivie de $p + e^- \rightarrow n + \nu_e$) et affecter ainsi sensiblement le refroidissement des étoiles de faible masse. Une couche de noyaux très fortement déformés présente des

propriétés voisines des cristaux liquides (voir Pethick & Potekhin (1998)), ce qui pourrait avoir des conséquences importantes sur les modes d'oscillations de l'étoile ou encore les sauts de fréquences dans les pulsars.

Chapitre 7

Théorie des bandes

Sommaire

7.1	Introduction	153
7.2	Modèle des bandes	155
7.3	Symétries en mécanique quantique	157
7.4	Représentations du groupe symétrique	170
7.5	Symétries d'un cristal	171
7.6	Représentations du groupe d'espace	176
7.7	Limite de la matière nucléaire homogène	185
7.8	Surface de Fermi dans la théorie des bandes	191

« *I found to my delight that the wave differed from the plane wave of free electrons only by a periodic modulation. This was so simple that I didn't think it could be much of a discovery, but when I showed it to Heisenberg he said right away : 'that's it!'* »

F. Bloch, *Physics Today*, **29** (12), 23-27 (1976)

7.1 Introduction

La théorie des bandes a été fondée par Félix Bloch en 1928, c'est-à-dire deux ans après la découverte de l'équation éponyme de Schrödinger. Bloch montra que la fonction d'onde d'un électron dans un potentiel périodique est une onde plane modulée. Ce modèle prédit une structure en bandes dans le spectre d'énergie des électrons. Une des confirmations expérimentales les plus éclatantes de cette théorie est l'existence de matériaux métalliques et isolants. Depuis, le modèle des bandes a permis de comprendre une grande variété de phénomènes, comme par exemple les propriétés électriques et optiques des solides ou le comportement magnétique des métaux à basse température. La théorie des bandes a aussi donné naissance à l'industrie des semiconducteurs et à l'électronique. Cette théorie n'est

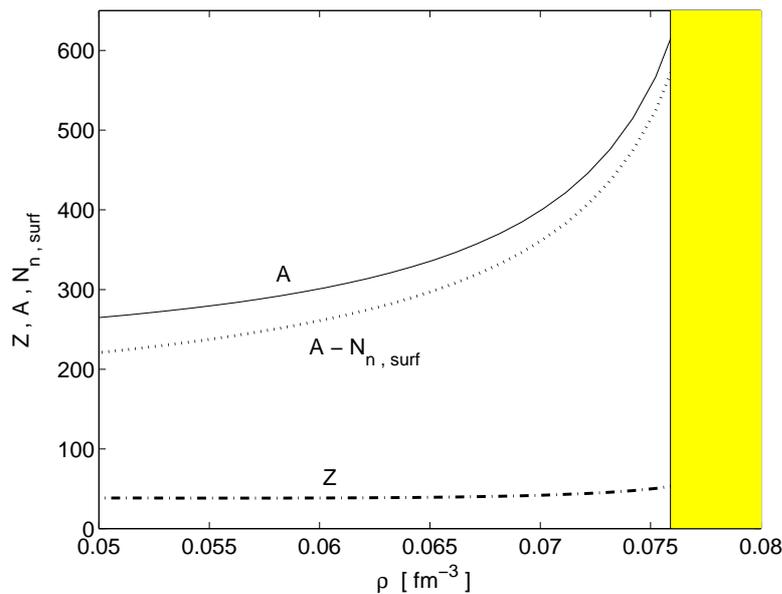


FIGURE 7.1 – Nombre de masse A et nombre de protons Z des noyaux sphériques dans l'écorce d'une étoile à neutrons, en fonction de la densité de nucléons ρ . La région grisée représente le manteau homogène. La composition des noyaux résulte d'un calcul de goutte liquide compressible par Douchin & Haensel (2000).

d'ailleurs pas confinée à la description des solides ordinaires. Pour preuve, ce formalisme a été récemment adapté pour la description des cristaux photoniques dont un exemple est illustré sur la figure 7.2, c'est-à-dire de matériaux dont l'indice de réfraction est spatialement périodique, les photons jouant le rôle des électrons (voir par exemple Joannopoulos *et al.* (1997)). Les chercheurs parviennent à contrôler la propagation de la lumière en fabriquant des matériaux (guides d'ondes) dont le spectre d'énergie des photons a été calculé précédemment. Les applications industrielles sont nombreuses, notamment dans les télécommunications. De tels cristaux photoniques s'observent également dans le monde vivant, comme par exemple dans certaines espèces de papillons (voir Biró *et al.* (2003)) et la souris de mer, et dans le monde minérale avec l'opale. Le même principe a été appliqué pour contrôler la propagation du son dans certains matériaux, connus sous le nom de cristaux phononiques, comme la structure illustrée sur la figure 7.3. Par ailleurs, les condensats de Bose-Einstein dans des pièges optiques ont permis de mettre en évidence des propriétés prédites par la théorie des bandes, comme par exemple les oscillations de Bloch (voir Niu *et al.* (2000)), qui sont difficiles à observer dans les solides du fait des phénomènes de dissipation. Les oscillations de Bloch ont également été récemment observées dans des cristaux photoniques par Sapienza *et al.* (2003). Jusqu'à présent, l'astrophysique nucléaire semble être restée très hermétique à la diffusion des concepts de physique du solide alors que la théorie des bandes trouve un champ d'application naturel à travers la description de l'écorce d'une étoile à neutrons. En effet, les neutrons « libres » dans l'écorce sont les analogues des électrons de conduction dans un solide ordinaire. Nous al-

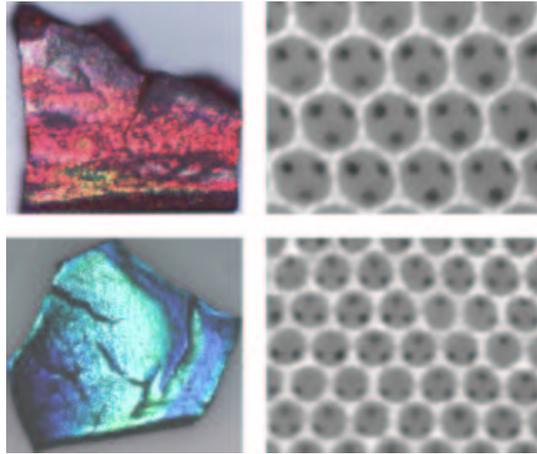


FIGURE 7.2 – Photographies (à gauche) de deux échantillons de cristaux photoniques (réseau cubique à faces centrées de bulles d’air dans du dioxyde de titane TiO_2) éclairés en lumière blanche. Le degré d’opalescence des échantillons est déterminé par la structure cristalline qui diffère par la constante de réseau, respectivement 480 nm (photographie en haut à droite) et 350 nm (photographie en bas à droite). Source : Koenderink *et al.* (2002).

lons donc présenter en détail cette théorie avant de l’appliquer dans ce contexte nucléaire. Parmi les nombreux ouvrages consacrés à la physique du solide, citons en particulier les livres de références de Ashcroft & Mermin (2003), de Jones & March (1985), de Harrison (1980), de Kittel (1963) et les livres plus récents de Grosso *et al.* (2000) et Marder (2000).

7.2 Modèle des bandes

7.2.1 Approximations

La théorie des bandes en physique du solide repose essentiellement sur deux approximations. Premièrement, les ions sont traités comme des particules classiques supposées fixes à leur position d’équilibre, sur les noeuds d’un réseau périodique : c’est l’approximation de Born-Oppenheimer. Cette approximation est justifiée par la très grande différence de masse entre électron et ion (la masse d’un électron est environ 1840 fois plus faible que la masse d’un nucléon). D’autre part, les électrons de conduction sont assimilés à des particules indépendantes soumises à un potentiel périodique, représentant les effets moyennés des interactions électron-électron et électron-ion. Ce potentiel moyen se déduit dans l’approximation Hartree-Fock du problème à N corps à partir des interactions électromagnétiques à deux corps. Une justification plus rigoureuse est fournie par la théorie de la fonctionnelle de densité. D’après le théorème de Hohenberg & Kohn (1964), l’énergie dans l’état fondamental d’un système de N électrons en interactions (et soumis au potentiel extérieur des ions) est une fonctionnelle unique de la densité électronique $n_e\{\mathbf{r}\}$. Dans

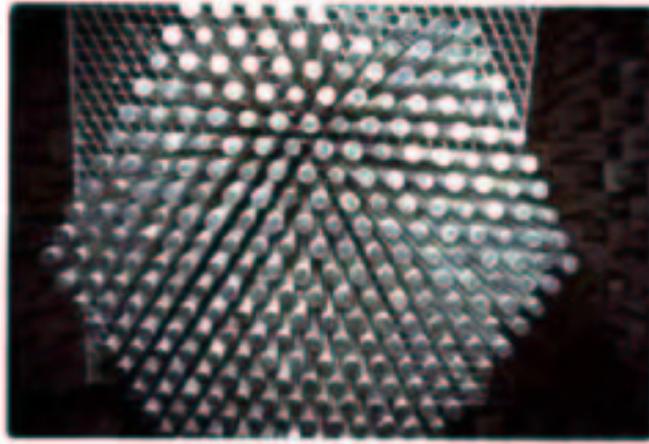


FIGURE 7.3 – Photographie d’un cristal phononique formé de plusieurs centaines de barres métalliques (de quelques centimètres de diamètres) suspendues à des positions périodiques d’un support dans une chambre sourde anéchoïque d’après Sánchez-Pérez *et al.* (1998). En variant le diamètre des barres et leur disposition, les auteurs ont réussi à complètement atténuer la propagation d’ondes sonores dans une certaine gamme de fréquences.



FIGURE 7.4 – Félix Bloch (1905-1983), lauréat du prix Nobel de physique 1952.

le formalisme de Kohn & Sham (1965), la densité qui minimise la fonctionnelle de l’énergie est exprimée comme résultant de N particules indépendantes. L’application du principe variationnel conduit ainsi à une équation de Schrödinger à une particule. La théorie de la fonctionnelle de densité permet de considérer des effets de corrélation entre les particules au delà de l’approximation Hartree-Fock. Néanmoins, l’interprétation physique de l’équation de Kohn-Sham est moins évidente.

7.2.2 De la physique du solide à la physique nucléaire

Nous allons maintenant adapter la théorie des bandes à la description des neutrons de conduction dans l’écorce d’une étoile à neutrons. La structure réelle de l’écorce est probablement très complexe, néanmoins peu d’études ont été réalisées jusqu’à présent depuis les travaux de Flowers & Ruderman (1977) sur la présence d’impuretés. Selon

Jones (2004) (voir les références citées), l'écorce aurait la structure d'un solide amorphe, contrairement aux résultats des travaux menés par de Blasio & Lazzari (1998) (voir les références citées). La question de la structure de la croûte est donc loin d'être tranchée. Par simplicité, nous adopterons l'hypothèse communément admise que l'écorce solide est constituée d'un cristal parfait de noyaux (voir par exemple Pethick & Ravenhall (1995)).

L'approximation de Born-Oppenheimer reste justifiée dans le contexte d'une étoile à neutrons, étant donné que les noyaux contiennent plusieurs centaines de nucléons (voir figure 7.1). Par ailleurs nous avons vu dans le chapitre précédent, que les nucléons pouvaient être décrits en première approximation comme des particules indépendantes. Nous supposons donc dans ce chapitre que les neutrons obéissent à une équation de Schrödinger du type

$$-\nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{\mathbf{r}\}} \nabla \varphi\{\mathbf{r}\} + V\{\mathbf{r}\}\varphi\{\mathbf{r}\} = \mathcal{E}\varphi\{\mathbf{r}\} \quad (7.1)$$

où $m^\oplus\{\mathbf{r}\}$ et $V\{\mathbf{r}\}$ ont la périodicité d'un réseau dont les noeuds sont situées en $\mathbf{T} = \ell^a \mathbf{e}_a$

$$m^\oplus\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = m^\oplus\{\mathbf{r}\}, \quad V\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = V\{\mathbf{r}\}. \quad (7.2)$$

$V\{\mathbf{r}\}$ est un potentiel moyen ressenti par chaque neutron qui résulte des interactions entre les neutrons et aussi avec les protons dans les noyaux. $m^\oplus\{\mathbf{r}\}$ est une masse effective « microscopique » associée à chaque neutron qui peut être différente de la masse ordinaire par les effets de milieu. Typiquement le potentiel moyen est attractif au voisinage des noyaux et constant en dehors. Quant à la masse moyenne, sa valeur à l'intérieur des noyaux est inférieure à sa valeur à l'extérieur (elle-même plus petite que la masse ordinaire m_n). En physique du solide, la masse effective microscopique $m^\oplus\{\mathbf{r}\}$ d'un électron est simplement égale à sa masse ordinaire. Le fait qu'en physique nucléaire cette masse n'est pas nécessairement constante résulte du fait que l'interaction nucléon-nucléon peut dépendre des vitesses des nucléons. Nous verrons dans le chapitre 8 comment déduire le potentiel moyen $V\{\mathbf{r}\}$ et la masse effective microscopique $m^\oplus\{\mathbf{r}\}$ à partir d'une interaction nucléon-nucléon effective dans l'approximation Hartree-Fock.

7.3 Symétries en mécanique quantique

Nous allons aborder la théorie des bandes du point de vue de la théorie des groupes, et plus précisément de la théorie des représentations (voir par exemple les livres d'introduction de Altmann (1991) et Knox & Gold (1964), ou l'ouvrage plus approfondi de Shoon K Kim (1999). Pour un exposé plus concis le lecteur pourra consulter l'article de revue de Johnston (1960)). Cette approche a le mérite d'apporter un éclairage particulier sur le rôle des symétries. Nous discuterons notamment dans cette section de la façon dont les symétries permettent de classer les états d'un système quantique et de déduire des règles de sélection. Les symétries fournissent également une aide précieuse dans la résolution de l'équation de Schrödinger. La décomposition de la fonction d'onde en harmoniques sphériques pour un système invariant par rotation est un exemple bien connu qui a été très largement exploité en physique nucléaire via l'approximation de Wigner-Seitz.

7.3.1 Symétrie et groupe de Schrödinger

Nous devons avant tout préciser la notion même de symétrie. Nous supposons que la fonction d'onde Ψ décrivant un système quantique, dépend d'un ensemble de variables notées ζ , les coordonnées spatiales de chaque particule par exemple, qui définissent un espace de configuration. Une transformation *physique* du système (rotation, translation, *etc.*) se traduit alors par une transformation des coordonnées dans l'espace de configuration $\zeta \mapsto \zeta' = g\zeta$ et induit une transformation de la fonction d'onde $\Psi \mapsto \Psi' = \hat{G}\Psi$, en notant g et \hat{G} les opérateurs agissant respectivement sur les coordonnées et la fonction d'onde. Cette transformation du système est par définition une opération de symétrie si le système demeure inchangé (rien ne distingue physiquement les deux situations), c'est-à-dire si cette nouvelle fonction d'onde en *chaque* point ζ' coïncide avec l'ancienne au point ζ , soit

$$\Psi'\{\zeta'\} = \Psi\{\zeta\}. \quad (7.3)$$

Comme cette condition doit être vérifiée pour chaque point de l'espace de configuration, notamment en $g^{-1}\zeta$, ceci nous permet de définir l'action de l'opérateur de symétrie \hat{G} correspondant par

$$\hat{G}\Psi\{\zeta\} = \Psi\{g^{-1}\zeta\}. \quad (7.4)$$

En remarquant que le produit de deux opérations de symétrie est encore une opération de symétrie, nous pouvons vérifier que l'ensemble des opérations de symétrie forment un groupe (en supposant que ces opérations sont inversibles), dont l'élément neutre est simplement la transformation identique exprimée en coordonnées par $\zeta \mapsto \zeta' = \zeta$. Plus précisément, l'ensemble des opérateurs g d'une part et l'ensemble des opérateurs \hat{G} d'autre part, constituent deux groupes isomorphes puisque $g_1g_2 = g_3 \Rightarrow \hat{G}_1\hat{G}_2 = \hat{G}_3$.

Considérons la transformation d'un opérateur \hat{O} , comme l'Hamiltonien par exemple, lors d'une transformation $\zeta \mapsto \zeta'$. Nous avons, en posant $\Psi \equiv \hat{O}\psi$, d'une part $\Psi' = \hat{G}\Psi = \hat{G}\hat{O}\psi$ et d'autre part $\Psi' = \hat{O}'\psi'$. Puisque $\psi' = \hat{G}\psi$ nous avons donc la relation

$$\hat{O}' = \hat{G}\hat{O}\hat{G}^{-1}. \quad (7.5)$$

Lors d'une opération de symétrie, puisque le système reste invariant, il doit être décrit par le même Hamiltonien donc $\hat{H}' = \hat{H}$, ou encore

$$\hat{G}\hat{H} = \hat{H}\hat{G}. \quad (7.6)$$

Plus généralement, nous pouvons donc définir une opération de symétrie par une transformation, caractérisée dans l'espace de Hilbert des fonctions d'ondes par un opérateur \hat{G} qui commute avec \hat{H} . L'ensemble de ces opérateurs forme d'ailleurs un groupe, appelé le groupe de Schrödinger \mathcal{G} . La propriété de fermeture est une conséquence de l'identité

$$[\hat{H}, \hat{G}_1\hat{G}_2] = [\hat{H}, \hat{G}_1]\hat{G}_2 + \hat{G}_1[\hat{H}, \hat{G}_2]. \quad (7.7)$$

Nous remarquons au passage qu'un opérateur du groupe de Schrödinger, plus simplement un opérateur de symétrie, n'est pas nécessairement linéaire. Par exemple si l'Hamiltonien \hat{H} est réel, le groupe de Schrödinger contiendra l'opérateur de conjugaison complexe.

Néanmoins dans la suite nous nous concentrerons sur les opérateurs linéaires de façon à pouvoir appliquer les résultats de la théorie des représentations. Nous discuterons séparément des autres symétries.

L'intérêt de cette définition du groupe \mathcal{G} provient du fait que, si Ψ est un état propre de \hat{H} pour l'énergie E , alors $\forall \hat{G} \in \mathcal{G}$, $\hat{G}\Psi$ est également un état propre associé à la même énergie E puisque $\hat{H}(\hat{G}\Psi) = \hat{G}\hat{H}\Psi = \hat{G}E\Psi = E(\hat{G}\Psi)$. Autrement dit, l'ensemble des états $\hat{G}\Psi$ sont dégénérés. Les symétries du système permettent donc de regrouper les états propres de l'Hamiltonien qui sont liés les uns aux autres par des opérateurs du groupe de Schrödinger.

7.3.2 Représentations du groupe de Schrödinger

Supposons qu'un état d'énergie E soit d fois dégénéré. N'importe quelle fonction d'onde Ψ dans ce sous-espace vectoriel s'écrit, par définition, comme une combinaison linéaire de d fonctions linéairement indépendantes Ψ_i , $i = 1, \dots, d$

$$\Psi = \sum_{i=1}^d c_i \Psi_i \quad (7.8)$$

dans laquelle c_i , $i = 1, \dots, d$ désignent des nombres complexes. En particulier, puisque les opérateurs de symétrie \hat{G} commutent avec \hat{H} , $\hat{G}\Psi_j$ appartient au même sous-espace que Ψ_j donc nous avons

$$\forall \hat{G} \in \mathcal{G}, \forall j = 1 \dots d \quad \hat{G}\Psi_j = \sum_{i=1}^d D\{\hat{G}\}_{ij} \Psi_i. \quad (7.9)$$

Les nombres complexes $D\{\hat{G}\}_{ij}$ forment les éléments d'une matrice de taille $d \times d$. De plus, nous pouvons facilement vérifier que ces matrices préservent la loi de multiplication du groupe

$$\forall \hat{G}_1, \hat{G}_2 \in \mathcal{G} \quad D\{\hat{G}_1 \hat{G}_2\} = D\{\hat{G}_1\} D\{\hat{G}_2\}. \quad (7.10)$$

En particulier, en notant $\hat{1}$ l'opérateur identité, nous avons

$$D\{\hat{1}\} = 1, \quad D\{\hat{G}^{-1}\} = D\{\hat{G}\}^{-1}. \quad (7.11)$$

Nous pouvons donc en conclure que l'ensemble des matrices $D\{\hat{G}\}$ est un homomorphisme¹ du groupe \mathcal{G} dans le groupe des opérateurs linéaires de l'espace de Hilbert. Les matrices $D\{\hat{G}\}$ définissent ainsi une représentation de dimension d du groupe de Schrödinger dont les fonctions $\{\Psi_i\}$, $i = 1, \dots, d$ sont une base. Les différentes fonctions $\{\Psi_i\}$ sont appelées les partenaires de la représentation. Si nous supposons en outre que les opérateurs \hat{G} sont

¹Lorsque la correspondance entre les éléments du groupe \mathcal{G} et les opérateurs est biunivoque, on parle d'isomorphisme.

hermitiques, $\hat{G}^\dagger = \hat{G}^{-1}$, c'est-à-dire qu'ils préservent le produit scalaire, nous obtenons la condition que les matrices de la représentation sont unitaires

$$\forall \hat{G} \in \mathcal{G}, D\{\hat{G}\}^\dagger D\{\hat{G}\} = 1. \quad (7.12)$$

Une représentation n'est pas unique, puisque par un changement de base des fonctions $\{\Psi_i\}$, $i = 1, \dots, d$ nous obtenons une nouvelle représentation de même dimension dont la matrice D' est reliée à la précédente par une relation de similarité du type $D' = UDU^{-1}$ où U est la matrice de passage définie par

$$\Psi_i = \sum_{j=1}^d U_{ji} \Psi'_j. \quad (7.13)$$

Au contraire, la trace d'une représentation aussi appelée le caractère de la représentation, définie par

$$\chi\{\hat{G}\} \equiv \text{Tr}\{D\{\hat{G}\}\} = \sum_{i=1}^d D\{\hat{G}\}_{ii} \quad (7.14)$$

est invariante dans des changements de base ¹. Deux représentations $D^{(\alpha)}$ et $D^{(\beta)}$ seront dites équivalentes si et seulement si $\forall \hat{G} \in \mathcal{G}, \chi^{(\alpha)}\{\hat{G}\} = \chi^{(\beta)}\{\hat{G}\}$. Autrement dit les matrices de ces représentations sont reliées par des transformations de similarité.

Connaissant deux représentations de dimension respectivement d_1 et d_2 , nous pouvons construire une représentation de dimension plus grande par la somme directe des matrices correspondantes $D^{(1)}$ et $D^{(2)}$. La nouvelle représentation $D = D^{(1)} \oplus D^{(2)}$, de dimension $d_1 + d_2$ s'exprime sous la forme

$$D\{\hat{G}\} = \begin{pmatrix} D^{(1)}\{\hat{G}\} & 0 \\ 0 & D^{(2)}\{\hat{G}\} \end{pmatrix}. \quad (7.15)$$

Inversement, étant donnée une représentation il se peut que par des relations de similarité, celle-ci se réduise à une forme diagonale par blocs. Dans ce cas, la représentation est réductible dans le sens qu'elle peut se décomposer en plusieurs autres représentations. Une représentation qui ne peut pas être diagonalisée par blocs sera dite *irréductible*.

7.3.3 Principe de Wigner

N'importe quel ensemble d'états propres dégénérés de \hat{H} engendre une représentation du groupe de Schrödinger dont la dimension est égale au nombre de fonctions propres dégénérées. Nous supposons que cette représentation est irréductible. L'expérience montre que ce postulat, connu sous le nom de principe de Wigner, est vérifié en général. Dans certains cas particuliers, notamment pour certains types de Hamiltoniens, il peut apparaître

¹La trace d'un produit de matrices A , B et C est invariante par permutation circulaire de ces matrices donc $\text{Tr}\{ABC\} = \text{Tr}\{BCA\} = \text{Tr}\{CAB\}$.

que des états appartenant à des représentations irréductibles différentes soient dégénérés. Nous parlerons alors de dégénérescence accidentelle par opposition à la dégénérescence essentielle déduite des symétries. Dans le cadre du principe de Wigner, cela signifie que nous avons oublié des symétries en ne considérant qu'un sous groupe du groupe de Schrödinger. Cette situation se produit par exemple pour le gaz d'électrons libres traités dans le cadre de la théorie des bandes, dans la limite où le potentiel et la masse effective locale sont constantes. Dans ce cas, le système est invariant sous n'importe quelles rotations et translations dans l'espace et possède donc une symétrie évidemment plus grande que la symétrie d'un cristal. C'est pourquoi nous trouvons que des états appartenant à des représentations irréductibles différentes sont dégénérés. Le cas de l'atome d'hydrogène est une autre illustration du principe de Wigner. Du fait de la forme particulier de l'interaction coulombienne¹, le Hamiltonien possède une symétrie plus grande que l'invariance par rotation. Il est possible de montrer que le groupe de symétrie de l'atome d'hydrogène est $SO(4)$, c'est-à-dire le groupe des rotations à non pas à trois mais à quatre dimensions (voir par exemple Blaizot & Tolénado (1997)). Cette symétrie cachée, une fois prise en compte permet d'expliquer les dégénérescences observées.

En étudiant seulement les symétries du système, nous pouvons donc obtenir une classification des niveaux d'énergie par des nombres (quantiques) étiquetant les représentations irréductibles du groupe de Schrödinger \mathcal{G} et les partenaires d'une même représentation. Par exemple, le groupe des rotations spatiales $SO(3)$ fournit deux nombres quantiques, le nombre quantique orbital l et le nombre quantique azimutal m . Le premier (associé à une des valeurs propres du carré du moment cinétique par la correspondance $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$) caractérise une représentation irréductible, et le second, $-l \leq m \leq l$ distingue un des $2l+1$ partenaires de la représentation. De plus, le degré de dégénérescence d'un niveau est donné par la dimension de la représentation irréductible correspondante. En général, l'ensemble de ces nombres quantiques n'est pas suffisant pour déterminer complètement un état propre du système. En effet, il peut arriver que des états propres associés à des valeurs propres différentes appartiennent à des représentations irréductibles équivalentes. Ceci est notamment le cas lorsque le groupe de Schrödinger est d'ordre fini puisque en général le nombre de valeurs propres du Hamiltonien est infini.

7.3.4 Représentations irréductibles d'un groupe

La détermination des représentations irréductibles d'un groupe est un problème mathématique dont l'un des piliers sont les lemmes de Schur :

Lemme 1

Etant données deux représentations *irréductibles* $D^{(\alpha)}$ et $D^{(\beta)}$ de dimension respectivement d_α et d_β , du groupe \mathcal{G} , s'il existe une matrice M telle que

$$\forall \hat{G} \in \mathcal{G}, D^{(\alpha)}\{\hat{G}\}M = MD^{(\beta)}\{\hat{G}\}. \quad (7.16)$$

¹En mécanique classique, Bertrand (1873) a montré que les trajectoires d'une particule dans un champ central de type Képlérien (potentiel en $1/r$) ou harmonique (potentiel en r^2), sont fermées. Il en résulte certaines lois de conservations.

- ★ Si $d_\alpha \neq d_\beta$ alors M est une matrice nulle
- ★ Si $d_\alpha = d_\beta$ alors soit $M = 0$, soit $D^{(\alpha)}$ et $D^{(\beta)}$ sont équivalentes.

Lemme 2

Si D est une représentation irréductible du groupe \mathcal{G} , et s'il existe une matrice M telle que

$$\forall \hat{G} \in \mathcal{G}, D\{\hat{G}\}M = MD\{\hat{G}\}, \quad (7.17)$$

alors la matrice M est diagonale, de la forme $M = \lambda 1$, où λ est une constante et 1 est la matrice identité.

Nous allons appliquer ces deux lemmes pour démontrer un théorème fondamental. Soient deux représentations irréductibles inéquivalentes $D^{(\alpha)}$ et $D^{(\beta)}$. Considérons la matrice définie par

$$M \equiv \sum_{\hat{G}} D^{(\beta)}\{\hat{G}\} X D^{(\alpha)}\{\hat{G}^{-1}\}, \quad (7.18)$$

où X est une matrice arbitraire. Nous avons alors $\forall \hat{G} \in \mathcal{G}$

$$\begin{aligned} D^{(\beta)}\{\hat{G}\}M &= \sum_{\hat{G}'} D^{(\beta)}\{\hat{G}\} D^{(\beta)}\{\hat{G}'\} X D^{(\alpha)}\{\hat{G}'^{-1}\} \\ &= \sum_{\hat{G}'} D^{(\beta)}\{\hat{G}\hat{G}'\} X D^{(\alpha)}\{\hat{G}'^{-1}\} D^{(\alpha)}\{\hat{G}^{-1}\} D^{(\alpha)}\{\hat{G}\} \\ &= MD^{(\alpha)}\{\hat{G}\}. \end{aligned} \quad (7.19)$$

Dans la deuxième ligne, nous avons utilisé la propriété d'homomorphisme et dans la troisième ligne, nous avons appliqué le théorème de réarrangement. D'après le lemme 1, nous pouvons en conclure que $M = 0$. En particulier, en choisissant la matrice X telle que le seul élément non nul est X_{kl} nous avons la relation

$$\sum_{\hat{G}} D^{(\beta)}\{\hat{G}\}_{ik} D^{(\alpha)}\{\hat{G}^{-1}\}_{lj} = 0. \quad (7.20)$$

Considérons maintenant la matrice

$$M \equiv \sum_{\hat{G}} D^{(\alpha)}\{\hat{G}\} X D^{(\alpha)}\{\hat{G}^{-1}\}. \quad (7.21)$$

Cette matrice commute avec la matrice de la représentation $D^{(\alpha)}$:

$$D^{(\alpha)}\{\hat{G}\}M = MD^{(\alpha)}\{\hat{G}\}. \quad (7.22)$$

Ceci implique d'après le lemme 2, que la matrice M est une constante fois la matrice identité. En choisissant la matrice X comme précédemment, en posant $M = \lambda_{kl} 1$, nous avons

$$\sum_{\hat{G}} D^{(\alpha)}\{\hat{G}\}_{ik} D^{(\alpha)}\{\hat{G}^{-1}\}_{lj} = \lambda_{kl} \delta_{ij}. \quad (7.23)$$

Nous pouvons déterminer la constante λ_{kl} en calculant la trace de M

$$\begin{aligned}
\text{Tr}\{M\} &= \lambda_{kl} d_\alpha = \sum_i \sum_{\hat{G}} D^{(\alpha)}\{\hat{G}\}_{ik} D^{(\alpha)}\{\hat{G}^{-1}\}_{li} \\
&= \sum_{\hat{G}} D^{(\alpha)}\{\hat{G}^{-1}\hat{G}\}_{lk} \\
&= \sum_{\hat{G}} D^{(\alpha)}\{\hat{1}\}_{lk} \\
&= \sum_{\hat{G}} \delta_{kl} = |\mathcal{G}| \delta_{kl}.
\end{aligned} \tag{7.24}$$

Nous pouvons rassembler ces résultats dans le théorème suivant.

Théorème d'orthogonalité

Etant données deux représentations *irréductibles* $D^{(\alpha)}$ et $D^{(\beta)}$ de dimension respectivement d_α et d_β , du groupe \mathcal{G} d'ordre $|\mathcal{G}|$ nous avons la propriété d'orthogonalité

$$\sum_{\hat{G} \in \mathcal{G}} D^{(\alpha)}\{\hat{G}\}_{ij} D^{(\beta)}\{\hat{G}^{-1}\}_{kl} = \frac{|\mathcal{G}|}{d_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{il} \delta_{jk}. \tag{7.25}$$

Pour un groupe fini, n'importe quelle représentation est équivalente à une représentation unitaire. Dans ce cas, la condition précédente devient

$$\sum_{\hat{G} \in \mathcal{G}} D^{(\alpha)}\{\hat{G}\}_{ij} D^{(\beta)}\{\hat{G}\}_{lk}^* = \frac{|\mathcal{G}|}{d_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{il} \delta_{jk}. \tag{7.26}$$

Nous pouvons exprimer ces conditions comme des relations d'orthonormalité

$$\vec{\Gamma}_{\alpha ij} \vec{\Gamma}_{\beta kl}^\dagger = \delta_{\alpha ij, \beta kl}, \tag{7.27}$$

entre des vecteurs $\vec{\Gamma}_{\alpha ij}$ d'un espace à $|\mathcal{G}|$ dimensions, dont les composantes sont données par

$$\vec{\Gamma}_{\alpha ij} = \sqrt{d_\alpha / |\mathcal{G}|} \left\{ D^{(\alpha)}\{\hat{G}_1\}_{ij}, \dots, D^{(\alpha)}\{\hat{G}_{|\mathcal{G}|}\}_{ij} \right\}. \tag{7.28}$$

Pour chaque représentation irréductible $D^{(\alpha)}$, nous pouvons donc construire autant de vecteurs orthonormés que d'éléments de matrice, c'est-à-dire d_α^2 . Or comme le nombre de vecteurs orthonormés ne peut excéder la dimension de l'espace, nous pouvons en déduire que

$$\sum_{\alpha} d_\alpha^2 \leq |\mathcal{G}|. \tag{7.29}$$

Par conséquent le nombre de représentations irréductibles d'un groupe fini est fini. Par ailleurs, en prenant la trace des matrices dans l'expression (7.26), nous obtenons des relations d'orthogonalités pour les caractères

$$\sum_{\hat{G} \in \mathcal{G}} \chi^{(\alpha)}\{\hat{G}\} \chi^{(\beta)}\{\hat{G}\}^* = |\mathcal{G}| \delta_{\alpha\beta}. \tag{7.30}$$

En particulier, nous avons comme critère pour identifier une représentation irréductible unitaire $D^{(\alpha)}$ que

$$\sum_{\hat{G} \in \mathcal{G}} |\chi^{(\alpha)}\{\hat{G}\}|^2 = |\mathcal{G}|. \quad (7.31)$$

En particulier, la représentation triviale de dimension 1 (aussi appelée la représentation identité) qui à chaque élément $\hat{G} \in \mathcal{G}$ associe comme matrice le même nombre, par exemple 1, est irréductible. Nous pouvons d'ailleurs remarquer que quelle que soit la représentation (irréductible ou non), nous avons

$$\chi^{(\alpha)}\{\hat{1}\} = d_\alpha. \quad (7.32)$$

Les éléments d'une même classe \mathcal{C}_h possèdent le même caractère, noté $\chi_h^{(\alpha)}$. Nous avons donc, avec $|\mathcal{C}_h|$ le nombre d'éléments de la classe \mathcal{C}_h

$$\sum_h |\mathcal{C}_h| \chi_h^{(\alpha)} \chi_h^{(\beta)*} = |\mathcal{G}| \delta_{\alpha\beta}. \quad (7.33)$$

Cette relation traduit l'orthogonalité de vecteurs $\vec{\chi}^{(\alpha)}$ de composantes $\sqrt{|\mathcal{C}_h|} \chi_h^{(\alpha)}$ dans un espace vectoriel de dimensions le nombre de classes. Par le même argument que précédemment, nous pouvons donc en conclure que le nombre de représentations irréductibles est au plus égal au nombre de classes du groupe \mathcal{G} . Il est également possible de démontrer les relations (voir par exemple Hammermesh (1989))

$$\sum_\alpha |\mathcal{C}_h| \chi_h^{(\alpha)} \chi_k^{(\alpha)*} = |\mathcal{G}| \delta_{hk}. \quad (7.34)$$

Ceci implique que le nombre de représentations irréductibles est égal au nombre de classes de conjugaison du groupe. Pour le montrer, il suffit de choisir $h = k$ dans la seconde relation d'orthogonalité (7.34), de sommer sur h et d'utiliser la première relation d'orthogonalité (7.33).

Les caractères des représentations irréductibles d'un groupe sont en général donnés dans des tableaux du type de la table 7.1. Le nombre de lignes et le nombre de colonnes sont tous les deux égaux au nombre de classes de conjugaison du groupe. Les relations d'orthogonalité se traduisent par l'orthogonalité des lignes et des colonnes de la table de caractères (avec pour poids le nombre d'éléments dans la classe). Traditionnellement, la première ligne est dédiée à la représentation triviale, de dimension 1, qui attribue à chaque élément le nombre 1. La première colonne est l'ensemble des caractères pour l'élément neutre du groupe (qui forme une classe à part entière) qui sont égaux aux dimensions des représentations.

Théorème de Burnside

Supposons qu'une représentation unitaire D soit réductible et s'exprime par une somme directe de p_α représentations irréductibles $D^{(\alpha)}$ du type

$$D = p_1 D^{(1)} \oplus \dots \oplus p_n D^{(n)}. \quad (7.35)$$

TABLEAU 7.1 – Table de caractères d'un groupe possédant h classes de conjugaisons. Les lignes du tableau fournissent les caractères d'une même représentation irréductible pour les différentes classes.

	1	\mathcal{C}_2	...	\mathcal{C}_h
$D^{(1)}$	1	1	...	1
$D^{(2)}$	d_2	$\chi_2^{(2)}$...	$\chi_h^{(2)}$
\vdots	\vdots	\vdots		\vdots
$D^{(h)}$	d_h	$\chi_1^{(h)}$...	$\chi_h^{(h)}$

Autrement dit, la représentation D s'exprime comme une matrice qui contient le long de la diagonale, p_α fois la représentation $D^{(\alpha)}$. Par les relations d'orthogonalité (7.33), les entiers p_α sont définis de façon *unique*

$$p_\alpha = \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{\hat{G} \in \mathcal{G}} \chi\{\hat{G}\} \chi^{(\alpha)}\{\hat{G}\}^*, \quad (7.36)$$

où χ et $\chi^{(\alpha)}$ désignent les caractères des représentations D et $D^{(\alpha)}$ respectivement.

Ceci est particulièrement important puisque en général les caractères des représentations irréductibles des principaux groupes rencontrés en physique, sont tabulés dans la littérature. Nous pouvons maintenant démontrer le théorème de Burnside selon lequel la somme des carrés des dimensions des représentations irréductibles est égale à l'ordre du groupe

$$\sum_{\alpha} n_{\alpha}^2 = |\mathcal{G}|. \quad (7.37)$$

Avant de démontrer ce théorème, nous devons tout d'abord définir une représentation particulièrement importante, la représentation régulière. D'après le théorème de réarrangement, la multiplication de tous les éléments d'un groupe fini par un élément donné, est simplement une permutation de ces éléments. Etant donné un élément quelconque \hat{G} d'un groupe \mathcal{G} , et en supposant que $\hat{G}\hat{G}_i$ correspond à l'élément \hat{G}_j alors le théorème de réarrangement se traduit par un ensemble de relations du type

$$\hat{G}\hat{G}_i = \sum_{j=1}^{|\mathcal{G}|} \delta_{\hat{G}_j, \hat{G}\hat{G}_i} \hat{G}_j. \quad (7.38)$$

En particulier, pour n'importe quelle fonction Ψ , nous avons

$$\hat{G}\Psi_i = \sum_{j=1}^{|\mathcal{G}|} \delta_{\hat{G}_j, \hat{G}\hat{G}_i} \Psi_j, \quad (7.39)$$

en notant $\Psi_i \equiv \hat{G}_i \Psi$. Autrement dit, les éléments du groupes engendrent une représentation de dimension l'ordre du groupe $|\mathcal{G}|$ et dont les matrices sont données par $D\{\hat{G}\}_{ji} = \delta_{\hat{G}_j, \hat{G}_i}$. Cette représentation est appelée la représentation régulière. Les éléments des matrices de cette représentation sont simplement 0 ou 1. La matrice associée à l'élément neutre est simplement la matrice identité.

La représentation régulière est réductible en général. En appliquant le résultat à la représentation régulière, et en remarquant que le seul caractère non nul est $\chi\{\hat{1}\} = |\mathcal{G}|$ nous trouvons qu'elle contient exactement d_α fois la représentation $D^{(\alpha)}$. En corollaire, nous avons le théorème de Burnside (7.37).

En particulier, nous pouvons en déduire qu'un groupe abélien possède autant de représentations irréductibles que d'éléments et chaque représentation est unidimensionnelle. D'après le principe de Wigner, nous pouvons en conclure que si le groupe de Schrödinger est abélien, les niveaux d'énergie du Hamiltonien ne sont pas dégénérés. De ce point de vue, tout se passe donc comme si le système n'avait aucune symétrie.

7.3.5 Théorème de projection

Nous allons maintenant démontrer un théorème important qui permet de générer des fonctions d'ondes adaptées aux symétries du système. Nous verrons dans la section suivante que ces fonctions d'ondes permettent de simplifier la résolution de l'équation de Schrödinger et d'établir des règles de sélection.

L'opérateur $\hat{P}_{ij}^{(\alpha)}$ défini par

$$\hat{P}_{ij}^{(\alpha)} \equiv \frac{d_\alpha}{|\mathcal{G}|} \sum_{\hat{G} \in \mathcal{G}} D^{(\alpha)}\{\hat{G}\}_{ij}^* \hat{G}, \quad (7.40)$$

projette une fonction Ψ quelconque sur une base $\{\Psi_{\alpha i} \equiv \hat{P}_{ij}^{(\alpha)} \Psi\}$ (l'indice j étant fixé) appartenant à la représentation irréductible unitaire $D^{(\alpha)}$.

Pour démontrer ce théorème, il suffit de vérifier que la fonction $\hat{G}\Psi_{\alpha i}$ se transforme selon la représentation $D^{(\alpha)}$:

$$\begin{aligned} \hat{G}\Psi_{\alpha i} &= \frac{d_\alpha}{|\mathcal{G}|} \sum_{\hat{G}' \in \mathcal{G}} D^{(\alpha)}\{\hat{G}'\}_{ij}^* \hat{G}\hat{G}'\Psi \\ &= \frac{d_\alpha}{|\mathcal{G}|} \sum_{\hat{G}' \in \mathcal{G}} D^{(\alpha)}\{\hat{G}^{-1}\hat{G}'\}_{ij}^* \hat{G}'\Psi \\ &= \frac{d_\alpha}{|\mathcal{G}|} \sum_{\hat{G}' \in \mathcal{G}} \sum_k D^{(\alpha)}\{\hat{G}^{-1}\}_{ik}^* D^{(\alpha)}\{\hat{G}'\}_{kj}^* \hat{G}'\Psi \\ &= \sum_k D^{(\alpha)}\{\hat{G}\}_{ki} \frac{d_\alpha}{|\mathcal{G}|} \sum_{\hat{G}' \in \mathcal{G}} D^{(\alpha)}\{\hat{G}'\}_{kj}^* \hat{G}'\Psi \\ &= \sum_k D^{(\alpha)}\{\hat{G}\}_{ki} \Psi_{\alpha k}. \end{aligned} \quad (7.41)$$

L'opérateur $\hat{P}_{ij}^{(\alpha)}$ est un opérateur de projection au sens où il satisfait la propriété suivante :

$$\hat{P}_{ij}^{(\alpha)} \hat{P}_{kl}^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{jk} \hat{P}_{il}^{(\alpha)} \Rightarrow (\hat{P}_{ij}^{(\alpha)})^2 = \hat{P}_{ij}^{(\alpha)}. \quad (7.42)$$

Lorsque seuls les caractères des représentations irréductibles sont connus, il est toujours possible de construire des fonctions de base par l'opérateur $\hat{P}^{(\alpha)}$ défini par

$$\hat{P}^{(\alpha)} \equiv \sum_i \hat{P}_{ii}^{(\alpha)} = \frac{d_\alpha}{|\mathcal{G}|} \sum_{\hat{G} \in \mathcal{G}} \chi^{(\alpha)}\{\hat{G}\}^* \hat{G}. \quad (7.43)$$

Ces opérateurs satisfont la propriété de fermeture

$$\sum_\alpha \hat{P}^{(\alpha)} = \hat{1}. \quad (7.44)$$

Par conséquent n'importe quelle fonction Ψ peut se décomposer sous la forme

$$\Psi = \left(\sum_\alpha \hat{P}^{(\alpha)} \right) \Psi = \sum_\alpha \Psi_\alpha, \quad \Psi_\alpha \equiv \hat{P}^{(\alpha)} \Psi. \quad (7.45)$$

Symétrisation d'une fonction

Une application directe de ce théorème est la symétrisation d'une fonction Ψ lorsque la représentation $D^{(\alpha)}$ est la représentation triviale de dimension $d_1 = 1$:

$$D^{(1)}\{\hat{G}\} = 1 \Rightarrow \chi^{(1)}\{\hat{G}\} = 1 \quad \forall \hat{G} \in \mathcal{G} \quad (7.46)$$

auquel cas la fonction de base obtenue (une seule fonction puisque $d_1 = 1$) est donnée par

$$\Psi_1 \equiv \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{\hat{G}' \in \mathcal{G}} \hat{G}' \Psi, \quad (7.47)$$

est complètement symétrique par rapport au groupe \mathcal{G} , c'est-à-dire que $\hat{G}' \Psi_1 = \Psi_1$ par le théorème de réarrangement.

Prenons comme exemple le groupe d'inversion C_i qui ne possède que deux éléments, l'identité E et l'inversion spatiale i (notations de Schönflies). Nous pouvons immédiatement en déduire avec les théorèmes précédents que ce groupe admet deux représentations irréductibles de dimension un donc les matrices des représentations coïncident avec les caractères. Avec les relations d'orthogonalités (7.33) et puisque $\chi^{(\alpha)}\{E\} = 1$ (avec $\alpha = 1, 2$) nous avons les équations

$$1 + \chi^{(\alpha)}\{i\} \chi^{(\beta)}\{i\} = 2\delta_{\alpha\beta}, \quad (7.48)$$

dont la solution est donnée dans le tableau 7.2. La symétrisation d'une fonction $f\{\mathbf{r}\}$, qui dépend des coordonnées spatiales \mathbf{r} conduit alors à

$$f_1\{\mathbf{r}\} = \frac{1}{2} (f\{\mathbf{r}\} + f\{-\mathbf{r}\}), \quad (7.49)$$

qui est simplement la partie paire de f .

TABLEAU 7.2 – Table de caractères du groupe C_i .

	E	i
$D^{(1)}$	1	1
$D^{(2)}$	1	-1

Symétries de l'état fondamental d'un système quantique

Nous allons tout d'abord montrer un théorème concernant l'intégrale I d'une fonction $f\{\zeta\}$ dans tout un espace de configuration

$$I \equiv \int d\zeta f\{\zeta\}. \quad (7.50)$$

Considérons un groupe \mathcal{G} de transformations qui préservent la mesure de volume (de l'espace de configuration). Dans une telle transformation $\hat{G} \in \mathcal{G}$, induite par le changement de coordonnées $\zeta \mapsto \zeta' = g\zeta$, nous avons $f\{\zeta\} = f\{g^{-1}\zeta'\} = \hat{G}f\{\zeta'\}$ d'où par changement de variables dans l'intégrale, nous tirons

$$I = \int d\zeta f\{g^{-1}\zeta\}. \quad (7.51)$$

En sommant sur tous les éléments du groupe et en divisant par l'ordre du groupe, nous avons donc montré que

$$\int d\zeta f\{\zeta\} = \int d\zeta f_1\{\zeta\}, \quad f_1\{\zeta\} \equiv \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{\hat{G} \in \mathcal{G}} \hat{G}f\{\zeta\}. \quad (7.52)$$

En particulier, l'intégrale dans tout l'espace d'une fonction d'onde à une particule φ_α appartenant à une représentation $D^{(\alpha)}$, est nulle sauf lorsque la fonction d'onde appartient à la représentation triviale

$$\forall \alpha \neq 1 \quad \int d^3r \varphi_\alpha\{\mathbf{r}\} = 0, \quad (7.53)$$

d'où nous pouvons en déduire que la fonction d'onde associée à une représentation non triviale possède au moins un noeuds (c'est-à-dire change de signe au moins une fois). Comme le nombre de noeuds de la fonction d'onde augmente en général avec l'énergie, cela suggère également que l'état fondamental (fonction d'onde sans noeuds) appartient à la représentation triviale.

7.3.6 Règles de sélection

Les relations d'orthogonalités entre des représentations irréductibles permettent d'établir des règles de sélection. Considérons un ensemble de fonctions d'ondes $\{\Psi_{n\alpha i}\}$ qui

forment une base d'une représentation irréductible $D^{(\alpha)}$ unitaire d'un groupe \mathcal{G} . L'indice i variant de 1 à la dimension d_α de la représentation, distingue les différents vecteurs de la base. Nous avons introduit un indice n supplémentaire (nombre quantique principal) parce que, en général il existe plusieurs bases possibles. Par définition, nous avons donc

$$\hat{G}\Psi_{n\alpha i} = \sum_j D^{(\alpha)}\{\hat{G}\}_{ji}\Psi_{n\alpha j}. \quad (7.54)$$

Calculons les éléments de matrices d'un opérateur \hat{O} . Puisque la représentation est unitaire, celle-ci conserve le produit scalaire donc nous pouvons toujours écrire

$$\langle \Psi_{n\alpha i} | \hat{O} \Psi_{n'\beta j} \rangle = \langle \hat{G} \Psi_{n\alpha i} | \hat{G} \hat{O} \Psi_{n'\beta j} \rangle. \quad (7.55)$$

Supposons maintenant que n'importe lequel de ces éléments \hat{G} commute avec \hat{O}

$$\forall \hat{G} \in \mathcal{G}, \hat{G}\hat{O} = \hat{O}\hat{G} \quad (7.56)$$

d'où

$$\langle \Psi_{n\alpha i} | \hat{O} \Psi_{n'\beta j} \rangle = \sum_{k,l} D^{(\beta)}\{\hat{G}\}_{lj} D^{(\alpha)}\{\hat{G}\}_{ki} \langle \Psi_{n\alpha k} | \hat{O} \Psi_{n'\beta l} \rangle. \quad (7.57)$$

Cette dernière égalité est vraie quelque soit l'élément \hat{G} . En sommant sur tous les éléments du groupe \mathcal{G} et en utilisant la relation d'orthogonalité (7.25) nous parvenons finalement au théorème suivant :

$$\langle \Psi_{n\alpha i} | \hat{O} \Psi_{n'\beta j} \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \frac{1}{d_\alpha} \sum_k \langle \Psi_{n\alpha k} | \hat{O} \Psi_{n'\beta k} \rangle. \quad (7.58)$$

Ceci montre, en remplaçant l'opérateur \hat{O} par l'identité $\hat{1}$, que des fonctions d'onde appartenant à des représentations irréductibles non équivalentes sont orthogonales. De plus, au sein d'une même représentation, les différents vecteurs (qui sont linéairement indépendants) sont également orthogonaux.

7.3.7 Développement de Clebsch-Gordan-Wigner

Supposons que nous connaissions des bases $\{\Psi_{\alpha i}\}$ et $\{\Psi_{\beta j}\}$ des représentations irréductibles $D^{(\alpha)}$ et $D^{(\beta)}$. Etant données deux représentations irréductibles $D^{(\alpha)}$ et $D^{(\beta)}$ d'un même groupe \mathcal{G} . Le produit direct $D^{(\alpha\otimes\beta)} \equiv D^{(\alpha)} \otimes D^{(\beta)}$ de ces représentations est aussi une représentation de \mathcal{G} mais n'est pas irréductible en général. Cette représentation peut donc se décomposer en une somme directe de représentations irréductibles

$$D^{(\alpha\otimes\beta)} = (\alpha\beta|\gamma) D^{(\gamma)} \oplus \dots \quad (7.59)$$

Les nombres $(\alpha\beta|\gamma)$ sont déterminés par les relations d'orthogonalité (7.33) des caractères,

$$(\alpha\beta|\gamma) = \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{G \in \mathcal{G}} \chi^{(\alpha\otimes\beta)}\{G\} \chi^{(\gamma)}\{G\}^*. \quad (7.60)$$

Sachant que le caractère d'un produit direct de matrices est simplement le produit des caractères de chaque matrice, $\chi^{(\alpha\otimes\beta)} = \chi^{(\alpha)}\chi^{(\beta)}$, nous avons finalement

$$(\alpha\beta|\gamma) = \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{\hat{G} \in \mathcal{G}} \chi^{(\alpha)}\{\hat{G}\} \chi^{(\beta)}\{\hat{G}\} \chi^{(\gamma)}\{\hat{G}\}^* = (\beta\alpha|\gamma). \quad (7.61)$$

L'ensemble des fonctions de bases des représentations $D^{(\alpha)}$ et $D^{(\beta)}$ respectivement $\{\Psi_{\alpha i}, i = 1..d_\alpha\}$ et $\{\Psi_{\beta j}, j = 1..d_\beta\}$ permettent de construire une base de la représentation $D^{(\alpha\otimes\beta)}$ dont les fonctions sont données par

$$\Psi_{\gamma l}^{(s)} = \sum_{i=1}^{d_\alpha} \sum_{j=1}^{d_\beta} (\alpha\beta ij|\gamma sl) \Psi_{\alpha i} \Psi_{\beta j}. \quad (7.62)$$

L'indice s est associé à la multiplicité des représentations et varie donc de $s = 1$ à $s = (\alpha\beta|\gamma)$ (la représentation $D^{(\gamma)}$ apparaît un nombre de fois égal à $(\alpha\beta|\gamma)$ dans la décomposition du produit direct $D^{(\alpha\otimes\beta)}$). Les nombres $(\alpha\beta ij|\gamma sl)$ sont appelés les coefficients de Wigner (dans le cas du groupe des rotations, ces coefficients sont connus comme de Clebsch-Gordan).

7.4 Représentations du groupe symétrique

Une application immédiate de la théorie des représentations concerne la symétrie de permutation d'un ensemble de particules identiques. En conséquence des relations d'incertitude de Heisenberg, il n'est pas possible en mécanique quantique de suivre chacune des particules individuellement. Autrement dit les particules (de même nature) sont indiscernables. Ceci implique que l'Hamiltonien décrivant un ensemble de N particules identiques en interaction est invariant dans l'échange de particules et commute avec les opérateurs correspondant. L'ensemble des permutations de N particules est un groupe, le groupe symétrique \mathcal{S} , qui possède $N!$ éléments. L'élément neutre de ce groupe est simplement la permutation identique qui n'échange aucune particule. N'importe quelle permutation de N particules peut s'exprimer comme un ensemble de transpositions. Une transposition est simplement l'échange de deux particules.

D'après le principe de Wigner, les états propres de l'Hamiltonien sont associés aux représentations irréductibles du groupe de Schrödinger, en l'occurrence le groupe \mathcal{S} . Quel que soit le nombre N de particules, le groupe symétrique admet toujours deux représentations irréductibles unidimensionnelles. La première est simplement la représentation triviale ou symétrique, qui à chaque élément du groupe fait correspondre le même nombre (par exemple 1). La seconde représentation, appelée la représentation antisymétrique, associe à chaque élément $\hat{S} \in \mathcal{S}$, le nombre $D\{\hat{S}\}$ qui vaut $+1$ ou -1 selon que la permutation \hat{S} contient respectivement un nombre paire ou impaire de transpositions. Nous pouvons donc écrire $D\{\hat{S}\} = (-1)^{t\{\hat{S}\}}$, où $t\{\hat{S}\}$ est le nombre de transposition. $D\{\hat{S}\}$ s'appelle la signature de la permutation \hat{S} . Nous pouvons vérifier que la représentation antisymétrique

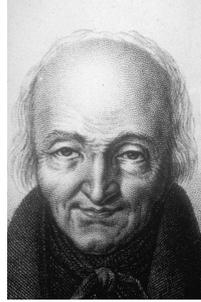


FIGURE 7.5 – René Just Haüy (1743-1822), fondateur de la cristallographie.

est irréductible en appliquant le critère (7.31)

$$\sum_{\hat{S} \in \mathcal{S}} |\chi\{\hat{S}\}|^2 = N!, \quad (7.63)$$

puisque le caractère de la représentation est donné par $\chi\{\hat{S}\} = (-1)^{t\{\hat{S}\}}$.

Dans la Nature, les représentations symétriques et antisymétriques sont les deux seules représentations irréductibles du groupe de permutations qui sont réalisées. Les particules qui appartiennent à la première sont des bosons et les particules de la seconde des fermions. Le groupe symétrique \mathcal{S} admet d'autres représentations irréductibles, pour lesquelles la fonction d'onde de N particules n'est ni symétrique ni antisymétrique dans l'échange de particules. Ces autres représentations ne sont pas observées dans la Nature.

Dans l'approximation de particules indépendantes, nous pouvons écrire la fonction d'onde Ψ de N particules comme un produit de fonctions d'ondes φ à une particule. D'après le théorème de projection (7.40), la fonction d'onde de N fermions est donnée par

$$\Psi\{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\} = \frac{1}{N!} \sum_{\hat{S} \in \mathcal{S}} (-1)^{t\{\hat{S}\}} \hat{S}\varphi\{\mathbf{r}_1\} \dots \varphi\{\mathbf{r}_N\}. \quad (7.64)$$

7.5 Symétries d'un cristal

La cristallographie ¹, comme étude systématique des structures cristallines, est une science née au XVIII^e siècle, notamment par les travaux en France de Jean Baptiste Romé de Lisle qui ouvre la voie à une description géométrique des cristaux en remarquant que les angles entre les faces adjacentes d'un cristal sont constants. Un progrès majeur est réalisé par l'abbé René Just Haüy. En faisant malencontreusement tomber un cristal de calcite, il découvre qu'en se brisant, les fragments de taille différente présentent toujours le même caractère facetté que le cristal d'origine. Haüy en déduit que le cristal d'origine peut être décrit par un empilement d'éléments semblables. C'est au début du XX^e siècle

¹L'étymologie du mot cristal provient du grec "Krystallos", qui aurait été inventé en 64 avant JC par Strabo pour désigner le quartz.

siècle que les premières expériences de diffraction par rayon X sur des solides apportent la preuve expérimentale que les cristaux sont formés d'un arrangement périodique d'atomes.

7.5.1 Groupe d'espace

Un solide ordinaire est caractérisé par la répétition plus ou moins périodique d'un groupe d'atomes ou de molécules dont la structure est idéalisée par un cristal parfait. Un cristal parfait est formé d'un arrangement périodique d'extension infinie d'un même groupes de particules. L'ensemble des transformations qui laisse le cristal invariant forme un groupe, le groupe d'espace \mathcal{G} . En particulier un cristal est invariant sous un ensemble de translations discrètes, qui forment un sous-groupe $\mathcal{T} \subset \mathcal{G}$ du groupe d'espace, caractérisées par des vecteurs

$$\mathbf{T} = \ell^a \mathbf{e}_a \quad (7.65)$$

en termes de trois vecteurs primitifs (ou fondamentaux) linéairement indépendants $\{\mathbf{e}_a\}$ et $\{\ell^a\}$ des entiers relatifs avec $a = 1, 2, 3$. Le parallélépipède dont les arêtes sont formées des trois vecteurs primitifs \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 et \mathbf{e}_3 est appelée une maille élémentaire¹ ou cellule primitive. Une maille quelconque est définie par un parallélépipède engendré par trois vecteurs de translations linéairement indépendants. Ces vecteurs sont fondamentaux et la maille est dite élémentaire ou primitive, s'ils reproduisent *tous* les points du réseau.

A chacun de ces vecteurs \mathbf{T} , nous pouvons associer un noeuds d'un réseau périodique, appelé le réseau de Bravais du cristal. Ce réseau est purement mathématique, dans le sens où, les noeuds ne coïncident pas nécessairement avec des particules du cristal. Il est important de souligner que le réseau de Bravais est défini seulement à partir de la symétrie de translation du cristal. Une maille élémentaire contient un seul noeuds (dans la cellule parallélépipédique, les noeuds présents à chaque sommet sont partagés par autant de cellules voisines).

Une maille élémentaire n'est pas définie de façon unique puisque par un changement de vecteurs primitifs, nous obtenons un autre parallélépipède. Plus généralement, une maille élémentaire est définie par n'importe quel polyèdre contenant l'ensemble maximal de points inéquivalents par translation. Une maille parallélépipédique est appelée une maille élémentaire unitaire. Une maille élémentaire particulière, la maille éponyme de Wigner-Seitz (aussi parfois appelée maille de Voronoï), tient une place privilégiée en physique du solide. Elle est définie par l'ensemble des points les plus proches d'un noeud donné du réseau que de n'importe quel autre noeud. Elle est donc centrée autour d'un noeud et a l'avantage de refléter la symétrie locale du réseau.

Une maille élémentaire est une maille de volume minimal. En effet, étant donnés trois vecteurs fondamentaux $\{\mathbf{e}_a\}$, le volume $\mathcal{V}_{\text{cell}}$ de la maille élémentaire s'exprime dans un système de coordonnées x^i , $i = 1, 2, 3$ par la formule

$$\mathcal{V}_{\text{cell}} = \varepsilon_{ijk} e_1^i e_2^j e_3^k, \quad (7.66)$$

¹Le terme a été formulé par un élève de Haiüy, du nom de Delafosse.

en notant e_a^i la i -ème composante du vecteur \mathbf{e}_a . Autrement dit, le volume s'exprime comme le déterminant de la matrice formée des éléments e_a^i . Considérons trois vecteurs de translations (pas nécessairement fondamentaux) $\mathbf{T}_b = \ell_b^a \mathbf{e}_a$ de composantes ℓ_b^a entières dans la base $\{\mathbf{e}_a\}$. Le volume de la maille parallélépipédique correspondante, qui est donné par le déterminant de la matrice $T_b^i = \ell_b^a e_a^i$, est égal au volume de la maille élémentaire multiplié par le déterminant d'une matrice dont les éléments ℓ_b^a sont des nombres entiers. Le volume de la maille est donc minimal lorsque $\det\{\ell_b^a\} = \pm 1$ c'est-à-dire lorsque la maille est élémentaire. Le volume d'une maille élémentaire est donc fixé par la structure du réseau, indépendamment de la forme de la maille.

La structure du cristal est reproduite en disposant sur chacun des noeuds du réseau de Bravais un même motif (un seul atome pour les solides les plus simples). Le groupe ponctuel du réseau de Bravais \mathcal{B} est défini par l'ensemble des transformations de symétrie qui laissent un point donné du réseau invariant. Comme ces transformations doivent préserver la distance entre les noeuds du réseau, ce sont donc des rotations propres ou impropres (c'est-à-dire des rotations associées ou non avec des réflexions). Néanmoins toutes les rotations ne sont pas possibles puisque nous devons avoir la condition de compatibilité

$$R\mathbf{T} \in \mathcal{T} \quad \forall R \in \mathcal{B}, \forall \mathbf{T} \in \mathcal{T}. \quad (7.67)$$

En particulier, étant donnés trois vecteurs primitifs du réseau cette condition peut s'écrire sous la forme

$$R\mathbf{e}_a = D\{R\}_{ba}\mathbf{e}_b, \quad (7.68)$$

dans laquelle $D\{R\}_{ab}$ est une matrice 3×3 dont les éléments sont des nombres entiers relatifs. En particulier la trace de cette matrice, qui est indépendante du choix des vecteurs de base, est également un nombre entier relatif. En coordonnées cartésiennes, la matrice de rotation d'angle θ autour de l'axe z , s'écrit

$$D\{R\} = \pm \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.69)$$

dont la trace est donnée par

$$\text{Tr}\left\{D\{R\}\right\} = \pm(1 + 2 \cos \theta), \quad (7.70)$$

le signe $+$ correspondant à des rotations et le signe $-$ à des rotations-réflexions. Nous pouvons donc en conclure que les seuls angles possibles sont $\theta = 2\pi/n$ avec $n = 1, 2, 3, 4$ ou 6 . Par conséquent le groupe ponctuel du réseau de Bravais ne peut contenir que cinq types d'axes de rotations notés respectivement C_1, C_2, C_3, C_4 et C_6 dans les notations de Schönflies. A deux dimensions, par le même raisonnement, nous trouvons que les mêmes axes de rotations compatibles C_1, C_2, C_3, C_4 et C_6 . Remarquons également que puisque si \mathbf{T} est un vecteur de translation alors $-\mathbf{T}$ en est aussi un, le réseau de Bravais possède l'inversion spatiale (ce qui n'est pas forcément le cas du cristal!).

Nous pouvons démontrer ce résultat d'une autre façon un peu moins connue, en s'appuyant sur des arguments purement topologique, empruntés à la théorie des graphes (voir par exemple Killingbeck (1970)). Un réseau bidimensionnel est une mosaïque de polygones identiques, formés de β arêtes chacun. Nous supposons que α arêtes se rejoignent à chaque sommet. Les nombres d'arêtes e , de sommets v et de polygones f du réseau sont donc reliés par

$$e = \frac{1}{2}v\alpha, \quad e = \frac{1}{2}f\beta, \quad (7.71)$$

où les facteurs $1/2$ proviennent des doubles comptages. Par ailleurs, il est bien connu en topologie que les nombres d'arêtes e , de sommets v et de polygones f (faces) satisfont la formule d'Euler $v + f - e = 2$ (une carte polygonal est homéomorphe à une sphère) que nous pouvons écrire sous la forme

$$\frac{v}{e} + \frac{f}{e} = \frac{2}{e} + 1. \quad (7.72)$$

Dans la limite d'un réseau infini $e \rightarrow +\infty$, les rapports v/e et f/e restant constants nous arrivons finalement à la condition

$$\frac{2}{\alpha} + \frac{2}{\beta} = 1. \quad (7.73)$$

Les seules solutions entières possibles sont $(\alpha, \beta) = (3, 6), (4, 4)$ et $(6, 3)$. Par conséquent, les seuls motifs périodiques à deux dimensions sont ceux dont les polygones ont trois, quatre ou six faces.

Dans les années 1970, Roger Penrose a montré qu'il était possible de construire un pavage ordonné du plan à deux dimensions, qui ne soit pas périodique et présente une symétrie d'ordre 5. Une dizaine d'années plus tard, Shechtman *et al.* (1984) mirent en évidence par des expériences de diffraction l'existence d'axes de rotation d'ordre cinq dans des alliages de $AlMn$. Cette découverte inattendue a été retentissante et a donné naissance à l'étude des quasicristaux. Ces solides un peu particuliers n'ont pas remis en cause les lois de la cristallographie, ils les ont au contraire étendues. En effet, Duneau & Katz (1985) ont montré que ces quasicristaux pouvaient s'interpréter comme la projection dans notre espace à trois dimensions de structures périodiques dans un espace à plus de trois dimensions.

Il est possible de démontrer qu'il n'existe que sept groupes ponctuels du réseau, qui donnent lieu à une classification en autant de systèmes cristallins (notations de Schönflies) : triclinique (C_i), monoclinique (C_{2h}), orthorhombique (D_{2h}), hexagonal (D_{6h}), trigonal (D_{3d}), tétragonal (D_{4h}) et enfin cubique (O_h). Chacun de ces systèmes rassemble des réseaux de Bravais possédant le même groupe ponctuel \mathcal{B} . Au sein d'un système donné, les réseaux sont encore classés par type. Deux réseaux appartiennent au même type si on peut passer de l'un à l'autre par une transformation continue sans briser la symétrie ponctuelle. Les réseaux de Bravais se répartissent ainsi en 14 types différents.

Un cristal est un réseau de Bravais habillé d'un motif, c'est-à-dire muni à chaque noeud d'un groupement d'atomes ou de molécules qui sont symbolisés par un ensemble de points géométriques possédant la même symétrie que le motif. On parle aussi dans ce cas

de réseau avec une base. Néanmoins, ce réseau avec base n'est plus en général un réseau de Bravais parce que les points ne sont pas tous équivalents par translation (des points représentant le motif ont été rajoutés au réseau de Bravais). Le groupe ponctuel du cristal \mathcal{P} n'est donc pas nécessairement identique au groupe ponctuel \mathcal{B} du réseau de Bravais mais est un sous-groupe $\mathcal{P} \subset \mathcal{B}$, contenant seulement les rotations compatibles avec la symétrie du motif. Lorsque les deux groupes coïncident, $\mathcal{P} = \mathcal{B}$ le groupe ponctuel est dit holohédrique. Il existe ainsi 32 classes cristallographiques correspondant au nombre total de sous-groupes des 7 groupes ponctuels du réseau de Bravais \mathcal{B} , ce qui fournit au total 230 groupes d'espace \mathcal{G} . Le groupe \mathcal{P} n'est pas un sous-groupe du groupe d'espace en général.

Un élément G du groupe d'espace \mathcal{G} , s'exprime comme la combinaison d'une rotation P suivie d'une translation \mathbf{t} . En adoptant les notations de Seitz, cet élément s'écrit sous la forme

$$G \equiv [P|\mathbf{t}]. \quad (7.74)$$

Les translations \mathbf{t} ne sont pas nécessairement des translations du réseau de Bravais, mais s'expriment en général comme la somme d'une translation \mathbf{T} du réseau et d'une translation fractionnaire $\tau_{\mathbf{P}}$ associée à la rotation P (plans de glissement et axe de vis). L'opérateur de Seitz est défini par son action sur les coordonnées d'un point \mathbf{r} par

$$[P|\mathbf{t}]\mathbf{r} \equiv P\mathbf{r} + \mathbf{t}. \quad (7.75)$$

Pour ne pas alourdir les notations, nous utiliserons le même symbole pour désigner un opérateur agissant sur des coordonnées et sur des fonctions d'onde. En appliquant cette définition, nous pouvons maintenant calculer le produit de deux éléments du groupe d'espace

$$\begin{aligned} GG'\mathbf{r} &= [P|\mathbf{t}][P'|\mathbf{t}']\mathbf{r} \\ &= [P|\mathbf{t}]\{P'\mathbf{r} + \mathbf{t}'\} \\ &= P\{P'\mathbf{r} + \mathbf{t}'\} + \mathbf{t} \end{aligned} \quad (7.76)$$

donc nous avons la loi de multiplication

$$[P|\mathbf{t}][P'|\mathbf{t}'] = [PP'|P\mathbf{t}' + \mathbf{t}]. \quad (7.77)$$

En appliquant cette règle, l'inverse est donné par

$$[P|\mathbf{t}]^{-1} = [P^{-1}| -P^{-1}\mathbf{t}], \quad (7.78)$$

l'élément neutre étant simplement

$$1 = [E|\mathbf{0}], \quad (7.79)$$

où E désigne l'élément neutre du groupe ponctuel.

Dans les notations de Seitz, le groupe ponctuel \mathcal{P} est formé par l'ensemble des éléments $\{P|\mathbf{0}\}$. Ce groupe n'est pas en général un sous-groupe du groupe d'espace \mathcal{G} parce que une rotation P est associée à une translation fractionnaire $\tau_{\mathbf{P}}$ donc $\{P|\mathbf{0}\} \notin \mathcal{G}$. En revanche

l'ensemble des translations du réseau de Bravais est un sous groupe de \mathcal{G} puisque $\{E|\mathbf{T}\} \in \mathcal{G}$ ($\tau_{\mathbf{E}} = \mathbf{0}$). De plus, le groupe des translations est un sous groupe invariant du groupe d'espace, ce qui est noté $\mathcal{T} \triangleleft \mathcal{G}$. Cela signifie que tous les conjugués des éléments de \mathcal{T} dans \mathcal{G} sont dans \mathcal{T} , autrement dit

$$\forall G \in \mathcal{G}, \forall [E|\mathbf{T}] \in \mathcal{T} \quad G[E|\mathbf{T}]G^{-1} \in \mathcal{T}. \quad (7.80)$$

La démonstration est immédiate :

$$\begin{aligned} [P|\mathbf{t}][E|\mathbf{T}][P|\mathbf{t}]^{-1} &= [P|\mathbf{t}][E|\mathbf{T}][P^{-1}| - P^{-1}\mathbf{t}] \\ &= [P|\mathbf{t}][P^{-1}| - P^{-1}\mathbf{t} + \mathbf{T}] \\ &= [E|P\mathbf{T}] \in \mathcal{T} \end{aligned} \quad (7.81)$$

Lorsque $\tau_{\mathbf{P}} = \mathbf{0} \forall P \in \mathcal{P}$, le groupe d'espace est dit symmorphique et chaque élément de \mathcal{G} peut s'écrire d'après la loi de multiplication $[P|\mathbf{T}] = [E|\mathbf{T}][P|\mathbf{0}]$. Or puisque \mathcal{T} est invariant sous \mathcal{P} , le groupe d'espace s'exprime comme un produit semidirect du groupe des translations et du groupe ponctuel, ce qui est noté $\mathcal{G} = \mathcal{T} \wedge \mathcal{P}$. Sur les 230 groupes d'espace, 73 sont symmorphiques.

7.6 Représentations du groupe d'espace

7.6.1 Représentations irréductibles du sous-groupe des translations

L'hypothèse sous jacente de la théorie des bandes, est que le potentiel et la masse effective sont des fonctions périodiques par rapport à des translations spécifiques définies par des multiples de trois vecteurs fondamentaux $\{\mathbf{e}_a\}$ avec $a = 1, 2, 3$ d'un réseau de Bravais. Le groupe de translation associé $\mathcal{T} = \mathcal{T}_1 \otimes \mathcal{T}_2 \otimes \mathcal{T}_3$ est abélien et se décompose en un produit direct des groupes de translation $\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2$ et \mathcal{T}_3 respectivement le long de $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ et \mathbf{e}_3 . Dans les notations de Seitz, le groupe \mathcal{T}_1 par exemple contient tous les éléments du type $[E|\ell^1\mathbf{e}_1]$ où ℓ^1 est un entier relatif. Un élément du groupe \mathcal{T} s'exprime alors sous la forme d'un produit $[E|\mathbf{T}] = [E|\ell^1\mathbf{e}_1][E|\ell^2\mathbf{e}_2][E|\ell^3\mathbf{e}_3]$. où ℓ^a sont des entiers relatifs.

L'action d'un opérateur de translation \hat{T} sur une fonction d'onde à une particule φ est définie par

$$\hat{T}\varphi\{\mathbf{r}\} \equiv \varphi\{\mathbf{r} - \mathbf{T}\}. \quad (7.82)$$

Comme dans le cas du gaz de neutrons libres, nous appliquons les conditions aux limites de Born-von Kármán. Dans le cas du cristal, il est judicieux de choisir comme volume macroscopique, un parallélépipède dont les arêtes sont formées des trois vecteurs $M^1\mathbf{e}_1, M^2\mathbf{e}_2$ et $M^3\mathbf{e}_3$ spécifiés par trois nombres entiers $M^1, M^2,$ et M^3 très grands. Le produit $N_{\text{cell}} = M^1M^2M^3$ représente le nombre de noeuds du réseau donc le nombre total de mailles (une maille contient un seul noeud). La fonction d'onde à une particule doit donc satisfaire les conditions

$$\varphi\{\mathbf{r} + M^1\mathbf{e}_1\} = \varphi\{\mathbf{r} + M^2\mathbf{e}_2\} = \varphi\{\mathbf{r} + M^3\mathbf{e}_3\} = \varphi\{\mathbf{r}\}. \quad (7.83)$$

Ceci implique en particulier que chacun des trois sous-groupes de translation \mathcal{T}_a est cyclique et contient autant d'éléments que le nombre M^a . Comme les représentations irréductibles d'un produit direct de groupes est le produit direct des matrices des représentations irréductibles de chacun des groupes, nous pouvons étudier ces groupes séparément. Puisque les opérateurs de translation commutent, chaque groupe \mathcal{T}_a est abélien et possède exactement M^a représentations irréductibles unidimensionnelles. Nous avons donc par exemple pour \mathcal{T}_1

$$\hat{T}_1 \varphi = \lambda_1 \{\mathbf{T}_1\} \varphi. \quad (7.84)$$

En effectuant en particulier, ℓ^1 translations successives de vecteur \mathbf{e}_1 nous avons la relation

$$\lambda_1 \{\ell^1 \mathbf{e}_1\} = \lambda_1 \{\mathbf{e}_1\}^{\ell^1}. \quad (7.85)$$

Pour des groupes finis, nous pouvons toujours nous restreindre à des représentations unitaires, ce qui implique que

$$|\lambda_1 \{\mathbf{T}_1\}|^2 = 1. \quad (7.86)$$

Nous pouvons donc poser

$$\lambda_1 \{\mathbf{e}_1\} \equiv e^{-i\nu_1}, \quad (7.87)$$

avec ν_1 un nombre réel. Par le fait que le groupe de translation est cyclique, nous pouvons finalement en déduire que les matrices des représentations irréductibles (des nombres puisque les représentations sont unidimensionnelles) sont données par les racines M^1 -ièmes de l'unité

$$\lambda_1 \{-M^1 \mathbf{e}_1\} = \lambda_1 \{-\mathbf{e}_1\}^{M^1} = 1 \Rightarrow \nu_1 M^1 = 2N_1 \pi, \quad (7.88)$$

où N_1 désigne un nombre entier que nous pouvons restreindre au domaine $0 \leq N_1 < M^1$ de façon à obtenir exactement M^1 représentations irréductibles.

En procédant de manière analogue pour les deux autres sous-groupes \mathcal{T}_2 et \mathcal{T}_3 , les représentations irréductibles du groupe de translation \mathcal{T} peuvent s'écrire sous la forme

$$\lambda \{\ell^a \mathbf{e}_a\} = \lambda_1 \{\mathbf{e}_1\}^{\ell^1} \lambda_2 \{\mathbf{e}_2\}^{\ell^2} \lambda_3 \{\mathbf{e}_3\}^{\ell^3} = e^{-i2\pi\nu_a \ell^a}, \quad (7.89)$$

avec $\nu_1 = N_1/M^1$, $\nu_2 = N_2/M^2$, $\nu_3 = N_3/M^3$.

7.6.2 Réseau réciproque et zone de Brillouin

L'expression de l'argument dans l'exponentielle (7.89) nous incite à introduire trois covecteurs $\{\mathbf{l}^a\}$ définis par les relations

$$\mathbf{l}^a \cdot \mathbf{e}_b = 2\pi \delta_b^a, \quad (7.90)$$

tels que $2\pi\nu_a \ell^a = \mathbf{k} \cdot \mathbf{T}$ avec $\mathbf{T} = \ell^a \mathbf{e}_a$ et $\mathbf{k} = \nu_a \mathbf{l}^a$. Nous avons en particulier la propriété

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} = 1, \quad (7.91)$$

pour des covecteurs $\mathbf{K} = \ell_a \mathbf{l}^a$ dont les composantes $\{\ell_a\}$ sont des entiers relatifs. Ces covecteurs particuliers peuvent donc s'interpréter comme les noeuds d'un réseau réciproque

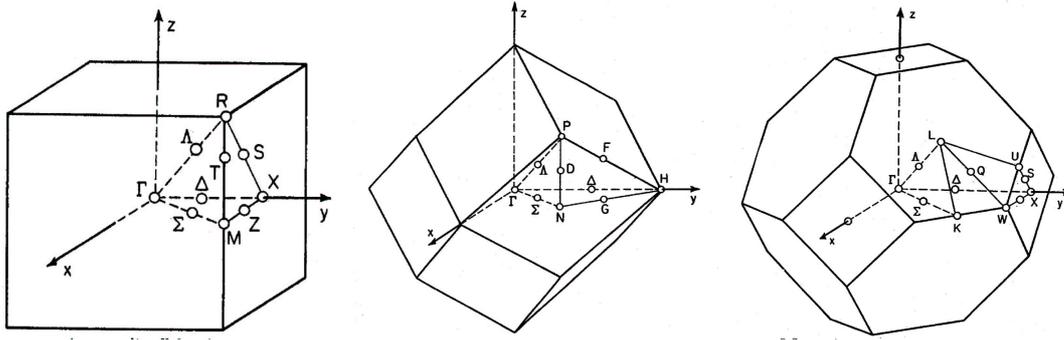


FIGURE 7.6 – Premières zone de Brillouin des réseaux cubiques (de gauche à droite) : cubique simple, cubique centré, cubique à faces centrées avec les points et lignes de symétrie. Source : Koster (1957).

dont les covecteurs fondamentaux sont $\{\mathbf{l}^a\}$. Le réseau physique est aussi parfois appelé réseau direct. Le réseau réciproque est donc défini uniquement à partir du réseau de Bravais, c'est-à-dire de la symétrie de translation du cristal, et possède donc toutes les symétries du réseau direct. Le réseau réciproque et le réseau direct ont donc le même groupe ponctuel \mathcal{B} . Ils ne sont pas pour autant identiques. Si le réseau réciproque d'un réseau cubique simple est effectivement un réseau cubique simple, le réseau réciproque d'un réseau cubique centré est un réseau cubique à faces centrées et vice versa. Cela signifie également que le réseau réciproque a en général une symétrie plus grande que le cristal.

Nous voyons également que les covecteurs \mathbf{k} et $\mathbf{k} + \mathbf{K}$ sont associés à la même représentation du groupe des translations. Par conséquent l'ensemble des $M^1 M^2 M^3 = N_{\text{cell}}$ représentations irréductibles *non équivalentes* de \mathcal{T} correspondent à N_{cell} covecteurs \mathbf{k} appartenant à une maille élémentaire du réseau réciproque. La cellule de Wigner-Seitz du réseau réciproque, centrée en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ est appelée la première zone de Brillouin. C'est cette cellule que nous choisirons dans la suite. Nous avons représenté les premières zone de Brillouin des réseaux cubiques sur la figure 7.6.

7.6.3 Théorème de Floquet-Bloch

Pour résumer, chaque représentation irréductible du groupe des translations \mathcal{T} est spécifiée par un covecteur \mathbf{k} sur une grille uniforme dans la première zone de Brillouin, contenant autant de points que de noeuds ou de maille du réseau direct. L'origine de la zone de Brillouin, correspondant au covecteur $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, est associée à la représentation triviale puisque

$$\forall \mathbf{T}, \quad \lambda_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}\{\mathbf{T}\} = 1. \quad (7.92)$$

La fonction d'onde doit donc satisfaire à la condition

$$\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}} \varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}. \quad (7.93)$$

Cette condition est remplie si la fonction d'onde s'exprime sous la forme d'une onde plane

modulée du type

$$\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}, \quad \forall \mathbf{T} \quad u_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = u_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}. \quad (7.94)$$

Ce résultat remarquable est connu sous le nom du théorème de Floquet-Bloch¹. Nous voyons sur cette expression que le covecteur \mathbf{k} s'interprète comme un vecteur d'onde. C'est la raison physique pour laquelle nous avons choisi la première zone de Brillouin pour le comptage des représentations irréductibles de façon à décrire des ondes se propageant dans toutes les directions, c'est-à-dire des fonctions d'ondes avec des vecteurs d'onde \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$.

Les relations d'orthogonalité des caractères (7.33) et (7.34) (des matrices elles-mêmes puisque ces dernières sont unidimensionnelles) se traduisent par les identités

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{T}-\mathbf{T}')} = M^1 M^2 M^3 \delta_{\mathbf{T},\mathbf{T}'}, \quad (7.95)$$

$$\sum_{\mathbf{T}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{T}} = M^1 M^2 M^3 \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \quad (7.96)$$

Par la suite nous travaillerons dans la limite dite thermodynamique, c'est-à-dire dans la limite où les dimensions $L^1 = M^1|\mathbf{e}_1|$, $L^2 = M^2|\mathbf{e}_2|$ et $L^3 = M^3|\mathbf{e}_3|$ du parallélépipède macroscopique sont très grandes devant la distance moyenne $l = n^{-1/3}$ entre les particules, la densité de particules n étant fixée. Dans cette limite, la grille des covecteurs \mathbf{k} est suffisamment fine pour que ses composantes varient de façon continue. Les composantes ν_a de ce covecteur s'expriment en fonction des composantes cartésiennes k_i par la formule $k_i = l_i^a \nu_a$ dans laquelle les nombres l_i^a sont les éléments de la matrice formée des composantes cartésiennes des covecteurs $\{l^a\}$. Le déterminant de cette matrice, $\det\{l\}$, est le volume de la maille élémentaire du réseau réciproque. Ainsi une somme discrète sur les covecteurs \mathbf{k} devient une intégrale

$$\sum_{\mathbf{k}} = \sum_{N_1, N_2, N_3} \mapsto \int d^3N \quad (7.97)$$

dont la mesure de volume d^3N est définie par

$$d^3N = N_{\text{cell}} \frac{d^3k}{\det\{l\}}. \quad (7.98)$$

Par la définition du réseau réciproque, le volume de la maille élémentaire, qui est égal au volume \mathcal{V}_{ZB} de la première zone de Brillouin, est donné par

$$\mathcal{V}_{\text{ZB}} = \det\{l\} = \frac{(2\pi)^3}{\mathcal{V}_{\text{cell}}}. \quad (7.99)$$

¹Ce théorème a été démontré pour la première fois pas le mathématicien Gaston Floquet (1883) dans le cadre des équations différentielles linéaires d'une seule variable mais d'ordre quelconque, puis redécouvert indépendamment un demi siècle plus tard par le physicien Félix Bloch durant sa thèse avec Werner Heisenberg. Par analyse de Fourier, Bloch (1928) démontra ce théorème éponyme pour l'équation de Schrödinger à trois dimensions avec un potentiel périodique.

En posant

$$\mathcal{V} \equiv N_{\text{cell}} \mathcal{V}_{\text{cell}}, \quad (7.100)$$

nous avons finalement dans la limite thermodynamique, la correspondance

$$\sum_{\mathbf{k}} \mapsto \int_{\text{ZB}} \mathcal{V} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \quad (7.101)$$

En conséquence du théorème de Bloch-Floquet, nous pouvons donc réduire la résolution de l'équation de Schrödinger à une maille élémentaire du réseau direct pour *chaque* covecteur \mathbf{k} , à condition d'appliquer un déphasage du type $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}}$ entre les faces opposées de la cellule. Mathématiquement l'équation de Schrödinger avec ces conditions aux limites admet un ensemble discret de solutions $\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}$, que nous distinguerons par un indice supplémentaire α . Pour un vecteur d'onde \mathbf{k} donné, les énergies propres sont donc quantifiées. Nous pouvons également démontrer que l'ensemble des fonctions d'ondes $\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}$ sont orthogonales lorsque \mathbf{k} est restreint à la première zone de Brillouin. Par la relation (7.96) d'orthogonalité des caractères, des fonctions d'ondes associées à des représentations irréductibles non équivalentes du groupe des translations, sont orthogonales. En effet, nous avons d'après le théorème de Bloch-Floquet

$$\begin{aligned} \int d^3r \varphi_{\alpha\mathbf{k}'}\{\mathbf{r}\}^* \varphi_{\beta\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} &= \left(\sum_{\mathbf{T}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{T}} \right) \int_{\text{cell}} d^3r \varphi_{\alpha\mathbf{k}'}\{\mathbf{r}\}^* \varphi_{\beta\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} \\ &= N_{\text{cell}} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \int_{\text{cell}} d^3r \varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}^* \varphi_{\beta\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} \\ &= N_{\text{cell}} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\alpha\beta} \int_{\text{cell}} d^3r |\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}|^2. \end{aligned} \quad (7.102)$$

La dernière égalité provient du fait que les fonctions propres d'un opérateur hermitique, associées à des valeurs propres distinctes sont orthogonales (si des valeurs propres sont dégénérées, nous pouvons toujours orthogonaliser les fonctions propres). La démonstration de l'orthogonalité des fonctions de Bloch repose sur la décomposition du volume du cristal en mailles élémentaires. Nous voulons insister sur le fait que la démonstration est indépendante de la forme particulière de la maille. En effet, nous pouvons déjà remarquer que le nombre de mailles est simplement égal au nombre de noeuds du réseau de Bravais. Ensuite l'intégrale, d'une fonction périodique $f\{\mathbf{r}\}$ est indépendante du choix de la cellule primitive. La preuve est immédiate :

$$\int_{\text{cell}} d^3r f\{\mathbf{r}\} = \frac{1}{N_{\text{cell}}} \int d^3r f\{\mathbf{r}\}. \quad (7.103)$$

Notons enfin que ces résultats s'appliquent évidemment à des fonctions périodiques dans le réseau réciproque.

Pour comprendre l'origine physique de la quantification des énergies, nous pouvons considérer un réseau dont les noeuds sont suffisamment éloignés pour que chaque atome

puisse être considéré comme isolé. Nous savons dans ce cas que les états propres d'un électron correspondent à des états liés avec des énergies discrètes. Dans la limite où les atomes sont infiniment éloignés les uns des autres, par la relation de dualité la zone de Brillouin se réduit à l'origine $\mathbf{k} = 0$. La fonction d'onde de Bloch s'exprime alors simplement par $\varphi_{\alpha\mathbf{0}}\{\mathbf{r}\} = u_{\alpha\mathbf{0}}\{\mathbf{r}\}$ et par conséquent la fonction de modulation $u_{\alpha\mathbf{0}}\{\mathbf{r}\}$ s'interprète comme une orbitale atomique. Nous voyons aussi que l'indice α est lié à la symétrie *locale* autour d'un atome. Dans la limite d'un système homogène, pour lequel le potentiel et la masse effective microscopique sont constants, qui est un autre cas limite de la théorie des bandes, la fonction d'onde est simplement une onde plane qui ne dépend que du vecteur d'onde \mathbf{k} . L'indice α est donc purement factice dans ce cas. Il traduit simplement le fait que la relation de dispersion a été translatée à l'intérieur d'une maille élémentaire du réseau réciproque.

Une fonction d'onde de Bloch incorpore donc les deux aspects, d'une part la symétrie *locale* d'un atome (indice de bandes α) et d'autre part la symétrie *globale* du cristal (vecteur d'onde \mathbf{k}).

7.6.4 Analyticité des bandes d'énergies

Comme \mathbf{k} varie de façon continue, les énergies $\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\}$ sont également continues et forment des nappes ou bandes dans l'espace \mathbf{k} , en supposant que les indices de bandes soient définis de telle sorte que $\mathcal{E}_\alpha < \mathcal{E}_\beta$ si $\alpha < \beta$. Nous avons vu par ailleurs que les représentations \mathbf{k} et $\mathbf{k} + \mathbf{K}$ étaient équivalentes donc

$$\varphi_{\alpha\mathbf{k}} = \varphi_{\alpha\mathbf{k}+\mathbf{K}}, \quad (7.104)$$

ce qui implique que ces nappes d'énergie sont périodiques dans le réseau réciproque d'où

$$\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\} = \mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k} + \mathbf{K}\}. \quad (7.105)$$

Les fonctions $\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\}$ sont non seulement continues mais plus généralement analytiques, excepté en des points particuliers. Considérons en effet un covecteur \mathbf{k}' voisin de \mathbf{k} et supposons que nous ayons déjà résolu l'équation de Schrödinger en \mathbf{k} . La fonction $e^{-i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\varphi_{\alpha\mathbf{k}+\delta\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}$, en posant $\delta\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}' - \mathbf{k}$, appartient à la même représentation du groupe des translations que les fonctions $\varphi_{\beta\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}$ et peut donc se développer sur ces fonctions :

$$\varphi_{\alpha\mathbf{k}+\delta\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} = \sum_{\beta} c_{\beta\alpha}\varphi_{\beta\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (7.106)$$

Nous pouvons ainsi réécrire l'équation de Schrödinger au point $\mathbf{k} + \delta\mathbf{k}$ comme un problème aux valeurs propres pour les coefficients $c_{\beta\alpha}$. Les énergies propres $\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k} + \delta\mathbf{k}\}$ sont les solutions d'une équation séculaire du type $f\{\delta\mathbf{k}, \mathcal{E}\} = 0$, dans laquelle la fonction f est analytique en $\delta\mathbf{k}$. En notant $\mathcal{E}_\alpha\{\delta\mathbf{k}\}$ les racines, cette fonction f peut se factoriser sous la forme

$$f\{\delta\mathbf{k}, \mathcal{E}\} = \prod_{\alpha} (\mathcal{E}_\alpha\{\delta\mathbf{k}\} - \mathcal{E}). \quad (7.107)$$

Le gradient de cette fonction par rapport à $\delta\mathbf{k}$ lorsque $\mathcal{E} = \mathcal{E}_\alpha\{\delta k\}$ est donc donné par

$$\frac{\partial}{\partial(\delta k_i)} f\{\delta\mathbf{k}, \mathcal{E}_\alpha\{\delta k\}\} = \frac{\partial \mathcal{E}_\alpha}{\partial(\delta k_i)} \prod_{\beta \neq \alpha} (\mathcal{E}_\beta\{\delta k\} - \mathcal{E}_\alpha\{\delta k\}). \quad (7.108)$$

Nous voyons ainsi que les dérivées de l'énergie $\mathcal{E}_\alpha\{\delta\mathbf{k}\}$ sont donc bien définies et continues, à condition que cette énergie ne soit pas dégénérée. Nous pouvons démontrer qu'il est en de même pour les dérivées d'ordre supérieur. En conclusion, les bandes d'énergies $\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\}$ sont analytiques, sauf éventuellement en des points \mathbf{k} où plusieurs bandes sont dégénérées.

7.6.5 Représentations irréductibles du groupe d'espace

Considérons l'action d'un opérateur $[P|\mathbf{t}]$ du groupe d'espace sur une fonction de Bloch et posons

$$\phi \equiv [P|\mathbf{t}]\varphi_{\alpha\mathbf{k}}. \quad (7.109)$$

Regardons comment se transforme cette fonction ϕ sous l'action d'un opérateur du sous-groupe des translations du réseau. En remarquant que

$$[E|\mathbf{T}][P|\mathbf{t}] = [P|\mathbf{t}][E|P^{-1}\mathbf{T}], \quad (7.110)$$

nous avons

$$\begin{aligned} [E|\mathbf{T}]\phi &= [P|\mathbf{t}][E|P^{-1}\mathbf{T}]\varphi_{\alpha\mathbf{k}} \\ &= [P|\mathbf{t}]e^{-i\mathbf{k}\cdot(P^{-1}\mathbf{T})}\varphi_{\alpha\mathbf{k}} \\ &= e^{-iP\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}}[P|\mathbf{t}]\varphi_{\alpha\mathbf{k}} \\ &= e^{-iP\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}}\phi. \end{aligned} \quad (7.111)$$

Dans la troisième égalité, nous avons utilisé le fait que les opérateurs du groupe ponctuel conservent le produit scalaire donc $\mathbf{k} \cdot P^{-1}\mathbf{T} = (P\mathbf{k}) \cdot (PP^{-1}\mathbf{T})$. Nous voyons ainsi que la fonction ϕ se transforme comme une fonction de base d'une représentation irréductible du groupe des translations, spécifiée par le covecteur $P\mathbf{k}$.

Nous avons donc démontré que la fonction $[P|\mathbf{t}]\varphi_{\alpha\mathbf{k}}$ est encore une fonction de Bloch, associée au vecteur d'onde $P\mathbf{k}$, donc l'ensemble des fonctions de Bloch $\{\varphi_{\alpha P\mathbf{k}}\}$ pour tous les éléments $P \in \mathcal{P}$ du groupe ponctuel du cristal tels que $P\mathbf{k}$ appartienne à la première zone de Brillouin, engendrent une représentation du groupe d'espace. Le groupe d'espace \mathcal{G} est un groupe de symétrie, c'est-à-dire que ces opérateurs $[P|\mathbf{t}] \in \mathcal{G}$ commutent avec l'Hamiltonien \hat{H} , donc nous avons

$$\hat{H}([P|\mathbf{t}]\varphi_{\alpha\mathbf{k}}) = [P|\mathbf{t}]\hat{H}\varphi_{\alpha\mathbf{k}} = \mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\}([P|\mathbf{t}]\varphi_{\alpha\mathbf{k}}). \quad (7.112)$$

Les fonctions d'ondes $\{[P|\mathbf{t}]\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\}$ ont donc toutes la même énergie. Or puisque la fonction $[P|\mathbf{t}]\varphi_{\alpha\mathbf{k}}$ est une fonction de Bloch associée au vecteur d'onde $P\mathbf{k}$, nous pouvons écrire

$$[P|\mathbf{t}]\varphi_{\alpha\mathbf{k}} = \varphi_{\beta P\mathbf{k}}. \quad (7.113)$$

Les énergies aux points \mathbf{k} et $P\mathbf{k}$ sont donc dégénérées $\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\} = \mathcal{E}_\alpha\{P\mathbf{k}\}$ et comme nous utilisons la *même* convention pour ordonner les bandes en un point \mathbf{k} , nous pouvons en conclure que chaque bande d'énergie possède la symétrie du groupe ponctuel \mathcal{P}

$$\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\} = \mathcal{E}_\alpha\{P\mathbf{k}\}, \quad \forall P \in \mathcal{P}. \quad (7.114)$$

Lorsque le groupe ponctuel est holohédrique ($\mathcal{P} = \mathcal{B}$), les bandes d'énergies possèdent toutes les symétries du réseau réciproque, puisque le groupe ponctuel est le même que celui du réseau de Bravais \mathcal{B} . Ceci n'est pas vrai en général parce que $\mathcal{P} \subset \mathcal{B}$.

Par ailleurs, les deux ensembles $\{P\mathbf{k} | \forall P \in \mathcal{P}\}$ et $\{P\mathbf{k}' | \forall P \in \mathcal{P}\}$ sont soit identiques soit disjoints. En effet, supposons que deux éléments de chacun des deux ensembles coïncident, par exemple $P\mathbf{k} = P'\mathbf{k}'$ avec $P, P' \in \mathcal{P}$ alors tous les éléments coïncident par le théorème de réarrangement. Nous pouvons ainsi partitionner l'ensemble des covecteurs \mathbf{k} dans la première zone de Brillouin en sous-ensembles disjoints. Nous pouvons ainsi contruire autant de représentations du groupe d'espace que de ces sous-ensembles. Les fonctions d'onde de chaque sous-ensemble ont les mêmes bandes d'énergies. Dans la résolution de l'équation de Schrödinger, nous pouvons donc nous restreindre à un sous domaine de la première zone de Brillouin, appelé un domaine irréductible (DI), en ne prenant pour chaque sous-ensemble $\{P\mathbf{k} | \forall P \in \mathcal{P}\}$ qu'un seul représentant. Il faut ici souligner que ce ne sont pas les symétries de la zone de Brillouin qui déterminent ces domaines irréductibles mais la symétrie du cristal qui est en général inférieure. Le rapport entre le volume de la première zone de Brillouin et le volume d'un domaine irréductible \mathcal{V}_{DI} est égal à l'ordre du groupe ponctuel du cristal, soit

$$\mathcal{V}_{ZB} = |\mathcal{P}|\mathcal{V}_{\text{DI}}. \quad (7.115)$$

Par exemple, pour les cristaux cubiques ($\mathcal{P} = O_h$), la première zone de Brillouin est formée de $|\mathcal{P}| = 48$ domaines irréductibles.

Nous avons montré que les énergies aux points \mathbf{k} et $P\mathbf{k}$ sont dégénérées. Qu'en est-il des énergies au *même* point \mathbf{k} ? Si pour le covecteur \mathbf{k} considéré, il existe des éléments $P \in \mathcal{P}$ autres que l'identité tels que

$$P\mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{K}, \quad (7.116)$$

où $\mathbf{K} = \ell_a \mathbf{l}^a$ est un vecteur du réseau réciproque alors nous avons la relation

$$[P|\mathbf{t}]\varphi_{\alpha\mathbf{k}} = \varphi_{\beta\mathbf{k}}. \quad (7.117)$$

Par conséquent, si les fonctions $\varphi_{\beta\mathbf{k}}$ et $\varphi_{\alpha\mathbf{k}}$ sont linéairement indépendantes alors l'énergie correspondante est dégénérée : $\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\} = \mathcal{E}_\beta\{\mathbf{k}\}$. Cette situation se traduit par le fait que plusieurs bandes se touchent au point \mathbf{k} . Lorsque $P = E$, nous ne pouvons tirer aucune conclusion puisque la relation (7.116) conduit à l'identité triviale $\varphi_{\alpha\mathbf{k}} = \varphi_{\alpha\mathbf{k}}$.

L'ensemble des éléments du groupe ponctuel qui laissent le point \mathbf{k} invariant (modulo un vecteur du réseau réciproque) est un groupe, appelé le groupe du covecteur \mathbf{k} et noté $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}$. Les éléments correspondants du groupe d'espace forment également un groupe, nommé

le petit groupe de \mathbf{k} . Nous voyons par ailleurs sur l'équation (7.116) que l'ensemble des fonctions $\{[P|\mathbf{t}]_{\varphi_{\alpha\mathbf{k}}}\}$ avec $P \in \mathcal{G}_{\mathbf{k}}$, forme une représentation du groupe $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}$ du vecteur \mathbf{k} , appelée la petite représentation. Les dégénérescences possibles des bandes en un point \mathbf{k} sont donc données par les dimensions des représentations irréductibles de $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}$. Pour un point quelconque \mathbf{k} de la zone de Brillouin, le groupe $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}$ se réduit simplement à l'identité et aucune dégénérescence essentielle n'est donc attendue. Seuls les points \mathbf{k} associés à des points ou lignes de symétries de la première zone de Brillouin donnent lieu à des dégénérescences de bandes.

Toutes les représentations irréductibles du groupe d'espace se déduisent des petites représentations du petit groupe de \mathbf{k} .

7.6.6 Relations de compatibilité

Les représentations irréductibles du groupe du vecteur \mathbf{k} ne sont pas complètement indépendantes d'un point à un autre de la première zone de Brillouin. En effet, par continuité dans l'espace \mathbf{k} , les fonctions d'onde d'une même bande en différents points doivent appartenir à des représentations compatibles. Mathématiquement, cela signifie que en s'éloignant d'un point de symétrie \mathbf{k}_0 , en $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \delta\mathbf{k}$ le long d'une ligne de symétrie inférieure ($\mathcal{G}_{\mathbf{k}} \subset \mathcal{G}_{\mathbf{k}_0}$) les représentations irréductibles de $\mathcal{G}_{\mathbf{k}_0}$ déduites dans $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}$ sont réductibles. Par conséquent, dans la limite $\delta\mathbf{k} \mapsto 0$, une représentation irréductible $D^{(\alpha)}\{\mathbf{k}_0\}$ de $\mathcal{G}_{\mathbf{k}_0}$ se décompose en une somme directe de représentations irréductibles $D^{(\beta)}\{\mathbf{k}\}$ de $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}$, de multiplicité p_{β}

$$D^{(\alpha)}\{\mathbf{k}_0\} = p_1 D^{(1)}\{\mathbf{k}\} \oplus p_2 D^{(2)}\{\mathbf{k}\} \oplus \dots \quad (7.118)$$

Les multiplicités sont données par les relations d'orthogonalité des caractères

$$p_{\beta} = \frac{1}{|\mathcal{G}_{\mathbf{k}}|} \sum_{\hat{G} \in \mathcal{G}_{\mathbf{k}}} \chi_{\mathbf{k}_0}^{(\alpha)}\{\hat{G}\} \chi_{\mathbf{k}}^{(\beta)}\{\hat{G}\}^*, \quad (7.119)$$

en notant $\chi_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}\{\hat{G}\}$ le caractère de la représentation $D^{(\alpha)}\{\mathbf{k}\}$.

7.6.7 Invariance par renversement du temps

Nous avons mentionné précédemment que lorsque l'Hamiltonien est réel, le groupe de Schrödinger contient l'opérateur de conjugaison complexe, noté \hat{C} . Cet opérateur est non linéaire et sort donc du cadre de la théorie des représentations. Une propriété importante de cet opérateur est qu'il commute avec tous les opérateurs de symétrie \hat{G} définis dans l'espace de configuration à condition que les coordonnées ζ soient toutes réelles. En effet, considérons l'action de ces opérateurs sur une fonction d'onde $\Psi\{\zeta\}$ de l'espace de Hilbert. Nous avons d'une part,

$$\hat{C}\hat{G}\Psi\{\zeta\} = \hat{C}\Psi\{G^{-1}\zeta\} = \Psi\{G^{-1}\zeta\}^*, \quad (7.120)$$

et d'autre part,

$$\hat{G}\hat{C}\Psi\{\zeta\} = \hat{G}\Psi\{\zeta\}^* = \Psi\{G^{-1}\zeta\}^*. \quad (7.121)$$

donc $[\hat{G}, \hat{C}] = 0$. En particulier, l'opérateur de conjugaison complexe commute avec tous les opérateurs du groupe d'espace du cristal. Soit $\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}$ une fonction de Bloch, nous avons

$$\begin{aligned} [E|\mathbf{T}]\left(\hat{C}\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}\right) &= \hat{C}[E|\mathbf{T}]\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} \\ &= \hat{C}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}}\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}}\left(\hat{C}\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}\right). \end{aligned} \quad (7.122)$$

Nous avons ainsi démontré que la fonction conjuguée $\hat{C}\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}$ est une fonction de Bloch de vecteur d'onde $-\mathbf{k}$. Comme l'opérateur de conjugaison appartient au groupe de Schrödinger, nous pouvons en conclure que les bandes d'énergies possèdent une symétrie d'inversion

$$\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\} = \mathcal{E}_\alpha\{-\mathbf{k}\}, \quad (7.123)$$

indépendamment de la présence d'une telle symétrie dans le cristal. L'opérateur de conjugaison complexe \hat{C} s'interprète comme un opérateur de renversement du temps, parce qu'il ne change pas les variables d'espace $\mathbf{r} \mapsto \mathbf{r}' = \mathbf{r}$ mais change le signe de l'impulsion $\mathbf{p} \mapsto \mathbf{p}' = -\mathbf{p}$.

7.7 Limite de la matière nucléaire homogène

7.7.1 Groupes continus et symétries

Nous n'avons considéré jusqu'à présent que des groupes finis. La théorie des représentations se généralise aux groupes continus (groupes de Lie), en introduisant une mesure d'intégration sur le groupe qui se substitue à la somme discrète sur les éléments du groupe (voir par exemple Hammermesh (1989)) :

$$\frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{\hat{G} \in \mathcal{G}} \mapsto \int_{\mathcal{G}} \quad (7.124)$$

(intégrale de Hurwitz). Les relations d'orthogonalités pour les groupes finis se transposent alors directement aux groupes de Lie. Selon le théorème de Racah, tout groupe de Lie semi-simple de rang n possède n opérateurs de Casimirs qui commutent avec tous les opérateurs du groupe et dont les valeurs propres déterminent de façon unique les représentations irréductibles du groupe de Lie (en nombre infini). Ce théorème peut également être étendu aux groupes de Lie abéliens.

7.7.2 Modèle du gaz de Fermi

Nous supposons pour simplifier que les neutrons peuvent être décrits comme des particules indépendantes évoluant dans un milieu uniforme, de volume \mathcal{V} très grand devant les échelles de distance microscopique. Le potentiel (local) à une particule V et la masse effective « microscopique »¹ m^\oplus sont donc constantes (ils peuvent néanmoins dépendre des densités de neutrons et de protons). Nous choisissons la valeur du potentiel comme origine des énergies. Ce modèle très simple, nous permettra d'introduire des concepts importants comme la surface de Fermi et la densité d'états que nous retrouverons plus loin dans le cadre de la théorie des bandes.

La fonction d'onde totale Ψ est ainsi un simple produit antisymétrisé de fonctions d'ondes à une particule φ obéissant à l'équation de Schrödinger

$$\frac{-\hbar^2}{2m^\oplus} \nabla^2 \varphi = \mathcal{E} \varphi, \quad (7.125)$$

Les propriétés de volume du gaz de neutrons ne doivent pas dépendre des effets de bords. Nous choisissons par commodité (manipulation d'exponentielles complexes) des conditions aux limites périodiques (Born-Von Kàrmàn) dans un cube de taille L et de volume $\mathcal{V} = L^3$

$$\varphi\{x + L, y, z\} = \varphi\{x, y, z\}, \varphi\{x, y + L, z\} = \varphi\{x, y, z\}, \varphi\{x, y, z + L\} = \varphi\{x, y, z\}. \quad (7.126)$$

Cette condition implique la quantification des énergies. Puisque le système est homogène, il est invariant sous le groupe des translations *continues*. Les opérateurs de ce groupe sont définis par la relation

$$\hat{T} \varphi\{\mathbf{r}\} = \varphi\{\mathbf{r} - \mathbf{T}\}. \quad (7.127)$$

En développant le second membre en série de Taylor, nous en déduisons l'expression de l'opérateur de translation

$$\hat{T} = e^{-\mathbf{T} \cdot \nabla} = e^{-i \mathbf{T} \cdot \hat{\mathbf{p}} / \hbar}, \quad (7.128)$$

où nous avons introduit l'opérateur impulsion $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ qui représente le générateur du groupe de Lie. Le groupe de translation étant abélien, les composantes de l'opérateur impulsion commutent et définissent trois opérateurs de Casimir. Les fonctions de base des représentations irréductibles (unitaires) sont donc déterminées par les états propres de l'impulsion, c'est-à-dire des ondes planes

$$\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} \equiv \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (7.129)$$

d'impulsion $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, où le vecteur d'onde \mathbf{k} a pour composantes en coordonnées cartésiennes ($i = x, y, z$)

$$k_i = \frac{2\pi}{L} N_i, \quad (7.130)$$

¹Dans un milieu homogène, il n'existe pas d'échelle de distance privilégiée, par conséquent la masse effective « microscopique » se réfère ici simplement aux définitions employées précédemment.

N_i étant un entier relatif.

Les ondes planes forment une base orthonormée de l'espace des états

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \int_{\mathcal{V}} d^3r \varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}^* \psi_{\mathbf{k}'}\{\mathbf{r}\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (7.131)$$

Pour être plus précis, la fonction d'onde complète d'une particule est le produit de $|\mathbf{k}\rangle$ par le ou les spineur $|\chi\rangle$ décrivant les degrés de spin, isospin, etc. Ces spineurs seront implicites dans la suite sauf lorsque les interactions feront intervenir ces degrés de liberté.

A la différence de particules classiques, l'énergie associée est quantifiée

$$\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\oplus}} = \frac{\hbar^2}{2m_{\oplus} L^2} (N_x^2 + N_y^2 + N_z^2) \geq 0. \quad (7.132)$$

Nous voyons également que l'énergie ne dépend que de la norme du vecteur d'onde \mathbf{k} . Ceci provient du fait que le système est aussi invariant par rotation et l'Hamiltonien commute donc avec tous les opérateurs du groupe des rotations spéciales SO(3) qui s'écrivent en fonction des composantes du moment cinétique $\hat{\mathbf{L}}$ ¹ sous la forme

$$\hat{R}\{\theta\} = e^{-i\hat{\mathbf{L}}\cdot\theta/\hbar}, \quad (7.133)$$

dans laquelle la norme et la direction du vecteur θ désignent respectivement l'angle et l'axe de la rotation. Par le même raisonnement que nous avons suivi pour démontrer qu'un opérateur du groupe d'espace transforme une fonction de Bloch en une autre fonction de Bloch dont le vecteur d'onde a tourné, nous pouvons montrer de même que la fonction d'onde $\hat{R}\{\theta\}|\mathbf{k}\rangle$ est une onde plane $|R\{\theta\}\mathbf{k}\rangle$. Comme le groupe des rotations est un groupe de symétries, toutes les ondes planes du type $\hat{R}\{\theta\}|\mathbf{k}\rangle$ sont dégénérées. Le système est en fait invariant sous le groupe Euclidien E(3) des translations-rotations. Le groupe des translations est un sous groupe invariant (abélien) du groupe Euclidien.

7.7.3 Limite thermodynamique

Dans la limite dite « thermodynamique », lorsque la taille L du cube est très grande devant la taille $l = n^{-1/3}$ du volume occupé par une particule pour une densité donnée n , le spectre d'énergie est continu. En effet, la densité n permet de définir une énergie caractéristique du système

$$\mathcal{E}_0 = \frac{\hbar^2}{2m_{\oplus} l^2}, \quad (7.134)$$

or l'espacement en énergie entre deux états voisins est un multiple impair de

$$\Delta\mathcal{E} = \frac{\hbar^2}{2m_{\oplus} L^2} \quad (7.135)$$

donc à la limite $L/l \rightarrow \infty$

$$\frac{\Delta\mathcal{E}}{\mathcal{E}_0} = \left(\frac{l}{L}\right)^2 \rightarrow 0. \quad (7.136)$$

¹Les composantes de l'opérateur moment cinétique sont définies par $\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} x^j \hat{p}^k = -i\hbar \varepsilon_{ijk} x^j \nabla^k$.

Cette limite sera implicite dans la suite. Une somme sur les états du système s'exprimera comme une intégrale par la correspondance

$$\frac{1}{L^3} \sum_{n_x, n_y, n_z} \mapsto \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (7.137)$$

Remarquons enfin que dans cette limite Ψ est mal définie mais ce problème n'est pas très sérieux puisque les états à une particule φ restent bien définis.

7.7.4 Etat fondamental à $T=0$ et surface de Fermi

Quel est alors l'état fondamental du système à température nulle ? Le principe de Pauli interdit à deux particules d'occuper le même état quantique. Par conséquent les neutrons n'ont nécessairement pas tous la même énergie quoique la plus basse possible. Le nombre (entre 0 et 1) statistique moyen de particules par état (à une particule) à la température T est donné par la distribution de Fermi-Dirac

$$f\{\mathcal{E}, T\} = \frac{1}{1 + \exp((\mathcal{E} - \mu)/k_B T)} \quad (7.138)$$

qui se réduit à une distribution de Heaviside à température nulle

$$f\{\mathcal{E}, T = 0\} = \vartheta\{\mu - \mathcal{E}\}. \quad (7.139)$$

μ désigne le potentiel chimique du système, défini à partir de la densité d'énergie U par

$$\mu \equiv \frac{dU}{dn}. \quad (7.140)$$

L'état fondamental à $T = 0$ est ainsi obtenu en affectant chaque particule à un état \mathbf{k} par énergie croissante jusqu'à l'énergie de Fermi \mathcal{E}_F :

$$n = \frac{g}{(2\pi)^3} \int d^3 k \vartheta\{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}\}, \quad (7.141)$$

en allouant une dégénérescence g à chaque état \mathbf{k} , c'est-à-dire en autorisant que g neutrons au maximum aient la même énergie $\mathcal{E}\{\mathbf{k}\}$, ici $g = 2$ pour le spin (en supposant que le milieu n'est pas polarisé). La densité d'énergie s'exprime par

$$U = \frac{g}{(2\pi)^3} \int d^3 k \mathcal{E}\{\mathbf{k}\} \vartheta\{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}\} = \frac{3}{5} \mathcal{E}_F n. \quad (7.142)$$

Le potentiel chimique est donc donné par

$$\mu = \frac{dU}{dn} = \mathcal{E}_F. \quad (7.143)$$

L'énergie de Fermi coïncide donc avec le potentiel chimique. L'état fondamental est ainsi caractérisé par la surface de Fermi, définie comme le lieu des points \mathbf{k} tels que $\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \mu$, avec

$$\mu = \frac{\hbar^2}{2m^\oplus} \left(\frac{6\pi^2 n}{g} \right)^{2/3}. \quad (7.144)$$

Cette surface est donc une sphère dans l'espace vectoriel \mathbf{k} . Par ailleurs le volume "englobé" par cette surface défini par

$$\mathcal{V}_F = g \int d^3k \vartheta\{\mu - \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}\} \quad (7.145)$$

est le volume d'une boule

$$\mathcal{V}_F = g \frac{4}{3} \pi k_F^3 = g \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2m^\oplus \mu}}{\hbar} \right)^3 \quad (7.146)$$

soit en fonction de la densité :

$$\mathcal{V}_F = (2\pi)^3 n. \quad (7.147)$$

Un état excité du système consiste, par exemple, à déplacer une particule dans un état \mathbf{k} à l'intérieur du volume de Fermi ($\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} < \mu$) dans un état \mathbf{k}' à l'extérieur ($\mathcal{E}\{\mathbf{k}'\} > \mu$). Nous pouvons ainsi déplacer plusieurs particules pour obtenir d'autres états excités. Les états excités sont donc décrits en termes de paires particules-trous. Cette représentation n'est pertinente que lorsque les états excités ont une énergie proche de celle de l'état fondamental.

La notion de surface de Fermi est un concept important en matière condensée dans la description d'un ensemble de fermions, qui n'est pas spécifique au modèle simplifié du gaz de Fermi. Cette notion se généralise en effet lorsque les particules ne sont plus supposées indépendantes mais interagissent fortement les unes avec les autres. Dans ce cas, les états *excités* de faible énergie peuvent être décrits en termes de *quasiparticules* indépendantes. La théorie de ces liquides de Fermi a été formulée par Landau de façon phénoménologique, puis justifiée a posteriori et étendue par le développement de méthodes perturbatives (la théorie quantique des champs) essentiellement dans les années 50-60, permettant de traiter de façon systématique le problème à N corps, a priori jusqu'à n'importe quel ordre de perturbation par des techniques diagrammatiques conçues par Feynman.

7.7.5 Densité d'états et espacement de niveaux

Les propriétés d'un système sont souvent associées aux états à une particule au niveau de Fermi. C'est pourquoi, il est intéressant de définir la densité d'états à une particule (vides ou occupés)

$$\mathcal{D}\{\mathcal{E}\} \equiv \mathcal{V} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta\{\mathcal{E} - \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}\}, \quad (7.148)$$

qui représente le nombre d'états dont l'énergie est comprise entre \mathcal{E} et $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$. En dimension d quelconque, c'est-à-dire dans le cas d'un gaz de particules de masse m^\oplus dans une boîte de dimension d , la densité d'états du gaz est donnée par la formule ¹

$$\mathcal{D}\{\mathcal{E}\} = \frac{2g\mathcal{V}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{2m^\oplus}{\pi}\right)^{d/2} \frac{\mathcal{E}^{d/2-1}}{\hbar^d}, \quad (7.149)$$

avec la fonction Γ définie par

$$\Gamma\{z\} \equiv \int_0^{+\infty} dt t^{z-1} e^{-t}. \quad (7.150)$$

Les expressions précédentes sont également valides pour un gaz de bosons : la densité d'états est indépendante de la statistique. La nature des particules (fermion/boson) est cachée dans la distribution $f\{\mathcal{E}, T\}$ qui est respectivement soit celle de Fermi-Dirac, soit celle de Bose-Einstein. Le nombre de particules dont l'énergie est comprise entre \mathcal{E} et $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$ à la température T est donné par $f\{\mathcal{E}, T\} \mathcal{D}\{\mathcal{E}\} d\mathcal{E}$.

La densité d'états joue un rôle souvent crucial dans le comportement des systèmes de particules. Dans le cas de fermions, c'est la densité d'états à la surface de Fermi qui intervient dans la plupart des grandeurs : dans la chaleur spécifique à basse température, la susceptibilité paramagnétique de Pauli, etc. En ce qui concerne les bosons, la condensation de Bose-Einstein par exemple, n'est possible que si la densité d'états tend vers zero à basse énergie puisqu'alors les bosons occupent tous le même état et le système est macroscopiquement cohérent. En dimension $d = 2$, la densité d'états est constante. Cela implique qu'il ne peut exister de condensat de Bose-Einstein puisque les bosons n'occupent pas un seul état d'énergie (le fondamental) mais un nombre macroscopique d'états d'énergie et ce quelque soit la température puisque $\mathcal{D}\{\mathcal{E}\}$ est proportionnel à la taille du système. La situation est encore plus dramatique à une dimension puisque la densité d'états diverge en $\mathcal{E} = 0$! Ces conclusions ne s'appliquent qu'au modèle du gaz de Bose et n'excluent pas la condensation de Bose-Einstein à un et deux dimensions lorsque les bosons interagissent.

L'espacement énergétique moyen $\Delta\{\mathcal{E}\}$ entre les niveaux quantiques dans la tranche d'énergie \mathcal{E} et $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$ est donné par

$$\Delta\{\mathcal{E}\} = \frac{d\mathcal{E}}{\mathcal{D}\{\mathcal{E}\}d\mathcal{E}} = \frac{1}{\mathcal{D}\{\mathcal{E}\}}. \quad (7.151)$$

Dans le cas du gaz de Fermi en dimension d , l'espacement s'exprime par la formule

$$\Delta\{\mathcal{E}\} = \frac{\Gamma(d/2)}{2g\mathcal{V}} \left(\frac{2m^\oplus}{\pi}\right)^{-d/2} \frac{\hbar^d}{\mathcal{E}^{d/2-1}} \propto \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{1}{\mathcal{E}^{d/2-1}}. \quad (7.152)$$

En introduisant la variable sans dimension $\tilde{\mathcal{E}} \equiv 2m^\oplus l^2 \mathcal{E} / \hbar^2$ avec $l \equiv n^{-1/d}$ et en posant $\mathcal{V} = L^d$, nous avons

$$\frac{\Delta\{\mathcal{E}\}}{\mathcal{E}} = \frac{\Gamma(d/2)}{2g} \left(\frac{\pi}{\tilde{\mathcal{E}}}\right)^{d/2} \left(\frac{l}{L}\right)^d. \quad (7.153)$$

¹L'angle solide Ω_d en d dimensions s'obtient en calculant de deux façons différentes l'intégrale dans tout l'espace $\int dx_1 \dots dx_d e^{-(x_1^2 + \dots + x_d^2)} = (\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2})^d = \Omega_d \int_0^{+\infty} r^{d-1} e^{-r^2} dr$ d'où $\Omega_d = 2(2\sqrt{\pi})^d / \Gamma\{d/2\}$.

Nous trouvons ainsi que l'origine de la discrétisation des niveaux d'énergie provient des conditions aux limites appliquées au système dans un volume fini (ceci a notamment des conséquences importantes en physique mésoscopique), puisque l'espacement relatif entre les niveaux $\Delta\{\mathcal{E}\}/\mathcal{E}$ est nul à la limite $l/L \rightarrow 0$. Cet espacement peut éventuellement diverger lorsque $\mathcal{E} = 0$: l'énergie d'une particule est purement cinétique donc positive, cela revient en quelques sortes à considérer un espacement infini entre le niveau fondamental et les énergies négatives.

7.8 Surface de Fermi dans la théorie des bandes

Nous allons maintenant aborder le cas plus général des neutrons « libres » dans un milieu nucléaire cristallin, c'est-à-dire lorsque la masse effective microscopique $m^\oplus\{\mathbf{r}\}$ et le potentiel moyen $V\{\mathbf{r}\}$ ne sont pas uniformes mais sont spatialement périodiques comme dans l'équation (7.2).

7.8.1 Définition

Comme pour le modèle du gaz de Fermi, la surface de Fermi est définie par l'ensemble des points dans l'espace \mathbf{k} tels que l'énergie à une particule coïncide avec le potentiel chimique μ introduit dans l'équation (7.141)

$$S_F \equiv \{\mathbf{k} | \mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \mu\}. \quad (7.154)$$

A priori, il n'y a aucune raison pour que cette surface soit une sphère. D'ailleurs, en général la surface de Fermi a une forme compliquée comme l'illustre la figure 7.7. En outre, la relation entre le potentiel chimique μ et la densité n n'est plus donnée par l'équation (7.144). Néanmoins il est important de souligner que contrairement à la *forme* de la surface de Fermi, le *volume* (7.145) englobé par cette surface est indépendant du détail des interactions entre les neutrons et le milieu et reste donné par l'expression (7.147).

7.8.2 Symétries de la surface de Fermi

Nous avons vu que les surfaces d'énergie constante dans l'espace des vecteurs d'onde \mathbf{k} sont simplement des sphères dans le modèle du gaz de Fermi, du fait que l'énergie d'un état à une particule ne dépend que de la norme de \mathbf{k} . Dans la théorie des bandes, l'énergie à une particule est toujours décrite par un vecteur d'onde \mathbf{k} mais l'énergie n'est invariante que sous certaines rotations discrètes, compatibles avec la triple périodicité du cristal. Ainsi l'énergie possède une symétrie de rotation résiduelle déterminée par les éléments du groupe ponctuel du cristal $\mathcal{E}\{P\mathbf{k}\} = \mathcal{E}\{\mathbf{k}\} \forall P \in \mathcal{P}$. De plus l'énergie dépend d'un indice de bandes α .

Nous pouvons également introduire un indice de bande pour décrire le spectre d'énergie du gaz de Fermi, en translatant les énergies dans la première zone de Brillouin d'un réseau

arbitraire. Ceci revient à résoudre l'équation de Schrödinger en termes d'ondes planes du type

$$\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_\alpha)\cdot\mathbf{r}}. \quad (7.155)$$

Cette limite du réseau « vide », connue sous le nom de modèle de Shockley (1937), est très utile en pratique pour tester des méthodes numériques de calculs des bandes. Ce modèle est également intéressant pour étudier des modèles plus réalistes. Par exemple, certains matériaux comme les métaux alcalins et nobles ont une structure de bandes assez proche de celle du réseau vide. La différence essentielle entre le modèle du gaz de Fermi et le modèle de Bloch s'observe dans les croisements de bandes. La réduction de symétrie dans le cristal par rapport à un milieu homogène se traduit par le phénomène de répulsion de niveaux : des bandes s'écartent l'une de l'autre (dans l'espace \mathbf{k}) en un point de croisement du modèle du réseau vide du fait de la levée de dégénérescence. Dans certains cas, il peut même apparaître des régions interdites, c'est-à-dire l'absence de solutions de l'équation de Schrödinger quel que soit le vecteur d'onde, dans un certain domaine d'énergie.

7.8.3 Propriétés de la surface de Fermi sur les bords de zone

Nous avons montré comment « replier » les énergies du gaz de Fermi dans la première zone de Brillouin. Inversement, nous pouvons aussi « déplier » les bandes d'énergies en dehors de la première zone de Brillouin dans des zones d'ordre supérieur. Plus généralement, les frontières d'une zone de Brillouin sont formées de l'ensemble des vecteurs \mathbf{k} tels que

$$\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{K}}{2} = \left(\frac{\mathbf{K}}{2} \right)^2 \quad (7.156)$$

ou $\mathbf{K} = \ell_a \mathbf{l}^a$ et $\{\ell_a\}$ des entiers relatifs. Ce sont les plans médians, dits de Bragg, des vecteurs \mathbf{G} du réseau réciproque. Remarquons que la définition (7.156) est la condition de diffraction de Bragg d'ondes dans un cristal : une onde incidente dont le vecteur d'onde \mathbf{k} satisfait à cette condition ne se propage pas dans le cristal (onde stationnaire) et est donc réfléchi. La n -ième zone de Brillouin est alors définie par l'ensemble des vecteurs \mathbf{k} qui coupent exactement $(n-1)$ plans de Bragg. La première zone est ainsi le plus petit covolume compris entre les plans médiateurs de $\pm\hat{\mathbf{l}}^1$, $\pm\hat{\mathbf{l}}^2$ et $\pm\hat{\mathbf{l}}^3$ à partir de l'origine. Les zones de Brillouin ont toutes le même covolume mais peuvent être formées de régions disjointes. Une bande d'énergie $\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\}$ est translatée dans la α -ième zone par des vecteurs du réseau réciproque. Cette représentation est dénommée schéma étendu ou développé. Cette représentation permet de faire apparaître de façon plus intuitive les déformations de la surface de Fermi par rapport à la sphère du gaz de Fermi. Nous avons déjà mentionné que les limites des zones de Brillouin sont des plans de Bragg correspondant à des ondes stationnaires dans le cristal. Par conséquent, nous pouvons nous attendre à ce que les déformations de la sphère de Fermi soient les plus importantes dans ces plans. En effet la présence d'une faible interaction entre les particules et le cristal laisse en général apparaître des discontinuités dans la surface de Fermi lorsque la sphère équivalente touche des bords de zone.

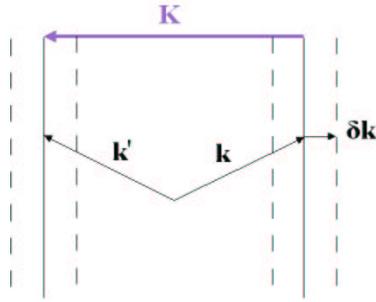


FIGURE 7.8 – Schéma d'un plan de symétrie.

Par ailleurs, lorsque les limites d'une zone de Brillouin sont parallèles à un plan de symétrie du cristal, la surface de Fermi coupe les bords de zone perpendiculairement. La démonstration est la suivante. La composante du gradient normale à ce plan est égale à

$$\frac{\partial \mathcal{E}_\alpha}{\partial k_n} = \lim_{\delta \mathbf{k} \rightarrow 0} \frac{\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k} + \delta \mathbf{k}\} - \mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k} - \delta \mathbf{k}\}}{2\delta \mathbf{k}}. \quad (7.157)$$

Or par symétrie, les deux points \mathbf{k} et \mathbf{k}' sont de part et d'autre d'un plan de symétrie donc comme le montre la figure 7.8, nous avons $\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k} - \delta \mathbf{k}\} = \mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}' + \delta \mathbf{k}\} = \mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k} + \mathbf{K} + \delta \mathbf{k}\}$. De plus par périodicité, nous avons $\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k} + \mathbf{K} + \delta \mathbf{k}\} = \mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k} + \delta \mathbf{k}\}$. Par conséquent la composante normale du gradient est nulle ou alors elle n'est pas définie. Néanmoins, nous pouvons écarter cette dernière possibilité pour des raisons physiques. En effet, nous verrons plus loin que le gradient de l'énergie représente la vitesse d'un paquet d'ondes qui doit être continue. Les discontinuités du gradient apparaissent en général pour des modèles trop simplifiés.

7.8.4 Densité d'états et topologie de la surface de Fermi

Les surfaces d'énergie constante ont donc en générale des formes très variées. La densité d'états $\mathcal{N}\{\mathcal{E}\}$, définie par le nombre d'états à une particule par unité de volume et par unité d'énergie, permet de sonder la topologie des surfaces d'énergie constante et en particulier de l'énergie de Fermi. La densité d'états s'exprime sous la forme d'une intégrale sur la surface de Fermi

$$\mathcal{N}\{\mathcal{E}\} = g \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \delta\{\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} - \mathcal{E}\} = \frac{g}{(2\pi)^3} \int_{\mathcal{E}\{\mathbf{k}\}=\mathcal{E}} \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}|}. \quad (7.158)$$

Nous voyons sur cette dernière expression que la densité d'états peut présenter des points anguleux, dits singularités de van Hove (1953), lorsque la surface d'énergie constante contient des points \mathbf{k} tels que $\nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E} = 0$. Réciproquement, ces points particuliers fournissent des indices sur la topologie de la surface de Fermi. Au voisinage d'un point critique, nous pouvons exprimer l'énergie comme une forme quadratique (dans les axes principaux) du type

$$\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \mathcal{E}_c \pm \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} \pm \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} \pm \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z}, \quad (7.159)$$

où nous avons introduit des masses positives $m_x, m_y, m_z > 0$. Le nombre de signes + ou - spécifie le type de point critique. Selon la convention de Phillips (1956) un point critique sera noté M_n où n est le nombre de signes -. Ainsi M_0 est associé à un minimum local de l'énergie, M_1 et M_2 sont des points d'inflexion et M_3 correspond à un maximum de l'énergie. En introduisant de nouvelles variables (homogènes à la racine carrée d'une énergie)

$$q_x = \frac{\hbar k_x}{\sqrt{2m_x}}, \quad q_y = \frac{\hbar k_y}{\sqrt{2m_y}}, \quad q_z = \frac{\hbar k_z}{\sqrt{2m_z}} \quad (7.160)$$

nous pouvons réécrire l'énergie sous la forme

$$\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \mathcal{E}_c \pm q_x^2 \pm q_y^2 \pm q_z^2. \quad (7.161)$$

La contribution à la densité d'états, de la région de l'espace \mathbf{k} au voisinage du point critique est donnée par

$$\mathcal{N}_c\{\mathcal{E}\} = \frac{g}{(2\pi)^3} \frac{\sqrt{2m_x m_y m_z}}{\hbar^3} \int_{\mathcal{E}\{\mathbf{q}\}=\mathcal{E}} \frac{d\Sigma}{|\nabla_{\mathbf{q}}\mathcal{E}|}. \quad (7.162)$$

Pour étudier le comportement de la densité d'états au voisinage de ces points critiques, nous pouvons nous restreindre aux cas où q_x et q_y ont un signe positif. En utilisant des coordonnées polaires dans le plan $\{q_x, q_y\}$, nous pouvons donc écrire

$$\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \mathcal{E}_c \pm q^2 \pm q_z^2, \quad q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}. \quad (7.163)$$

Une surface d'énergie constante a donc une symétrie de révolution autour de l'axe q_z . L'élément de surface entre les altitudes q_z et $q_z + dq_z$ est donné par la surface d'une bande cylindrique de rayon q et de largeur $dq_z / \cos \gamma$ d'où

$$d\Sigma = \frac{2\pi q dq_z}{\cos \gamma}, \quad (7.164)$$

avec

$$\cos \gamma = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial q} / |\nabla_{\mathbf{q}} \mathcal{E}| = \frac{q}{\sqrt{q^2 + q_z^2}}. \quad (7.165)$$

La densité d'états au voisinage d'un point critique s'exprime simplement comme

$$\mathcal{N}\{\mathcal{E}\} = \frac{g}{(2\pi)^3} \frac{\sqrt{2m_x m_y m_z}}{\hbar^3} \int_{\mathcal{E}\{\mathbf{q}\}=\mathcal{E}} \pi dq_z = \frac{g}{8\pi^2} \frac{\sqrt{2m_x m_y m_z}}{\hbar^3} [q_z]. \quad (7.166)$$

Nous écrivons la densité d'états comme la somme d'une fonction analytique et d'une fonction singulière de l'énergie $\mathcal{N}_s\{\mathcal{E}\}$. Nous nous intéresserons seulement à cette dernière.

Point critique M_0

Le point critique de type M_0 est un minimum local donc la contribution à la densité d'états est nulle pour $\mathcal{E} < \mathcal{E}_c$. Lorsque $\mathcal{E} > \mathcal{E}_c$, les surfaces d'énergie constante sont des ellipsoïdes donc l'altitude est bornée par $q_z = \pm\sqrt{\mathcal{E} - \mathcal{E}_c}$. La contribution à la densité d'états est alors donnée par

$$\mathcal{N}_s\{\mathcal{E}\} \propto \sqrt{\mathcal{E} - \mathcal{E}_c}. \quad (7.167)$$

Par conséquent la densité d'états est continue en $\mathcal{E} = \mathcal{E}_c$ mais sa dérivée est discontinue. C'est le seul type de singularité rencontré dans la densité d'états du gaz de Fermi, correspondant au minimum absolu de l'énergie.

Remarquons que dans ce cas, s'il existe d'autres régions de l'espace \mathbf{k} qui contribuent à la densité d'états alors la surface d'énergie constante correspondante est formée de plusieurs morceaux disjoints.

Point critique M_1 ou M_2

Les surfaces d'énergie constante associées à des points critiques de type M_1 ou M_2 sont des hyperboloïdes. Pour M_1 , lorsque $\mathcal{E} > \mathcal{E}_c$ les hyperboloïdes sont formés d'une seule branche donc les altitudes ne sont pas bornées et la densité d'états a un comportement régulier. En revanche lorsque $\mathcal{E} < \mathcal{E}_c$, les hyperboloïdes sont constitués de deux branches séparées le long de l'axes q_z entre les altitudes $-\sqrt{\mathcal{E}_c - \mathcal{E}}$ et $\sqrt{\mathcal{E}_c - \mathcal{E}}$. La pente de la densité d'états admet alors une asymptote en $\mathcal{E} = \mathcal{E}_c$

$$\mathcal{N}_s\{\mathcal{E}\} \propto \sqrt{\mathcal{E}_c - \mathcal{E}}, \quad \mathcal{E} < \mathcal{E}_c. \quad (7.168)$$

De manière analogue, pour un point de type M_2 , nous avons

$$\mathcal{N}_s\{\mathcal{E}\} \propto \sqrt{\mathcal{E} - \mathcal{E}_c}, \quad \mathcal{E} > \mathcal{E}_c. \quad (7.169)$$

Point critique M_3

Le point critique de type M_3 est un maximum local donc seul le domaine d'énergie $\mathcal{E} < \mathcal{E}_c$ contribue à la densité d'états. Les surfaces d'énergie constante sont des ellipsoïdes et la densité d'états se comporte comme

$$\mathcal{N}_s\{\mathcal{E}\} \propto \sqrt{\mathcal{E}_c - \mathcal{E}}. \quad (7.170)$$

7.8.5 Exemple du cubium

Nous avons illustré les singularités de la densité d'états dans le modèle du « cubium » sur la figure 7.9. Cet élément est purement fictif et désigne un modèle à une seule bande, associé à un réseau cubique simple¹. La relation de dispersion est de la forme

$$\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \mathcal{E}_0 + 2\gamma(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a), \quad (7.171)$$

¹Ce type de structure est assez rare. Le polonium (Po) est le seul élément connu qui adopte cette structure.

où a représente la distance entre deux plus proches voisins. Nous pouvons retrouver cette relation de dispersion avec le raisonnement suivant. Considérons un atome formé d'un seul électron et supposons que nous connaissions la fonction d'onde ϕ d'un électron dans un état s (moment cinétique nul) de l'atome isolé. Nous pouvons construire une fonction de Bloch approchée du cristal formé d'un arrangement périodique de ces atomes, par le théorème de projection

$$\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} = \frac{1}{N_{\text{cell}}} \sum_{\mathbf{T}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}} \phi\{\mathbf{r} - \mathbf{T}\}. \quad (7.172)$$

L'énergie au premier ordre est proportionnelle à la valeur moyenne de l'Hamiltonien \hat{H} du cristal¹, qui peut s'écrire sous la forme

$$\int d^3r \varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}^* \hat{H} \varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} = N_{\text{cell}} \sum_{\mathbf{T}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}} \int d^3r \phi\{\mathbf{r} - \mathbf{T}\} \hat{H} \phi\{\mathbf{r}\} \quad (7.173)$$

Dans l'approximation des liaisons fortes, seules les interactions entre plus proches voisins sont prises comptes. L'énergie est alors de la forme

$$\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \mathcal{E}_0 + 2\gamma \sum_{\mathbf{T}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}}, \quad (7.174)$$

où la somme ne porte que sur les plus proches voisins d'un atome donné. Pour un réseau cubique simple, chaque atome est entouré de six plus proches voisins situés à une distance a . Nous retrouvons ainsi la relation de dispersion du cubium.

Le gradient de l'énergie du cubium a pour composantes :

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_x} = -2a\gamma \sin k_x a, \quad \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_y} = -2a\gamma \sin k_y a, \quad \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_z} = -2a\gamma \sin k_z a. \quad (7.175)$$

Les points critiques sont les points \mathbf{k} pour lesquels le gradient de l'énergie est nul. A l'intérieur de la première zone de Brillouin, définie par $-\pi/a < k_x, k_y, k_z \leq \pi/a$, les coordonnées de ces points critiques sont telles que k_x, k_y, k_z prennent les valeurs 0 ou $\pm\pi/a$. La densité d'états présente donc quatre singularités de Van Hove répertoriées dans le tableau 7.3.

Nous pouvons voir sur la figure 7.10 que les points critiques sont associés à des changements de topologie des surfaces d'énergie constante. La singularité associée à l'énergie $\mathcal{E} = -1$ sur cette figure, marque la transition entre un ensemble périodique de sphères (dans tout l'espace \mathbf{k}) et la surface dite de Mackay, qui est caractéristique de la surface de Fermi des métaux monovalents de structure cubique simple.

Jusqu'à présent, nous n'avons considéré que des points critiques analytiques puisque nous avons implicitement supposé que l'énergie admettait un développement de Taylor autour de ces points. Néanmoins d'autres types de singularités peuvent survenir dans la densité d'états. Nous avons vu notamment que les bandes d'énergie sont analytiques à

¹Nous utilisons ici le fait que l'état ϕ n'est pas dégénéré.

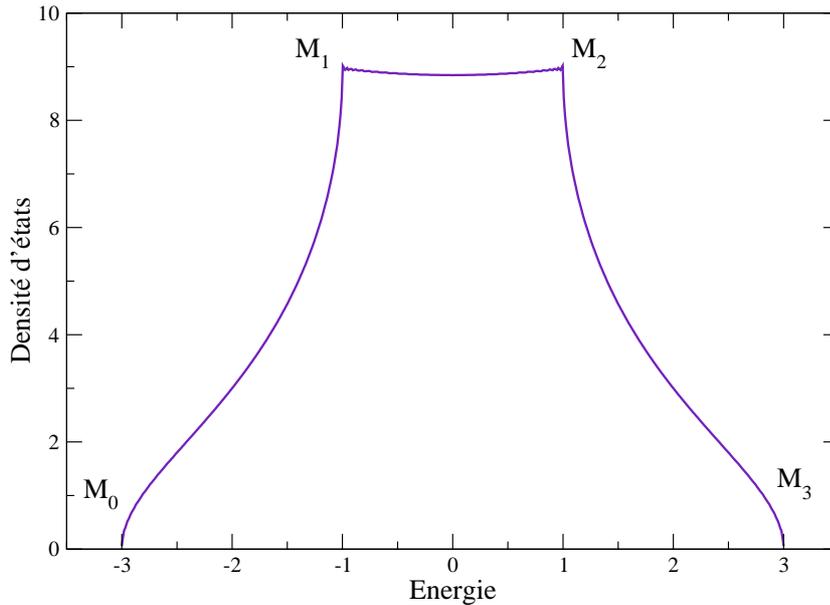


FIGURE 7.9 – Densité d'états du modèle de cubium avec $\mathcal{E}_0 = 0$, $\gamma = -0.5$ et $a = 1$ en fonction de l'énergie.

TABLEAU 7.3 – Coordonnées cartésiennes des points critiques du modèle du cubium et énergies associées.

$\{k_x, k_y, k_z\}$	$\mathcal{E} - \mathcal{E}_0$
$\{0, 0, 0\}$	6γ
$\{\pi/a, 0, 0\}, \{0, \pi/a, 0\}, \{0, 0, \pi/a\}$	2γ
$\{\pi/a, \pi/a, 0\}, \{\pi/a, 0, \pi/a\}, \{0, \pi/a, \pi/a\}$	-2γ
$\{\pi/a, \pi/a, \pi/a\}$	-6γ

l'exception de points de symétrie, pour lesquels plusieurs bandes sont dégénérées. Dans ce cas, le gradient de l'énergie n'est pas défini. Les bandes d'énergie peuvent également être accidentellement dégénérées en des points quelconques de la première zone de Brillouin.

Selon la convention adoptée pour les indices de bandes, il peut arriver que les contributions individuelles de plusieurs bandes à la densité d'états comportent des singularités qui disparaissent dans la densité d'états totale. Un exemple de ce type est fourni par le modèle du réseau vide. La densité d'états est régulière malgré les nombreux croisements de bandes parce que ces derniers sont artificiels, en ce sens que nous pouvons les éliminer par une translation appropriée de chaque bande d'énergie ¹.

¹Une fois toutes les bandes d'énergie du modèle de réseau vide translatées, l'énergie s'écrit simplement sous la forme $\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\oplus}}$. La densité d'états par unité de volume est alors donnée par l'expression (7.149) pour $d = 3$ divisée par \mathcal{V} .

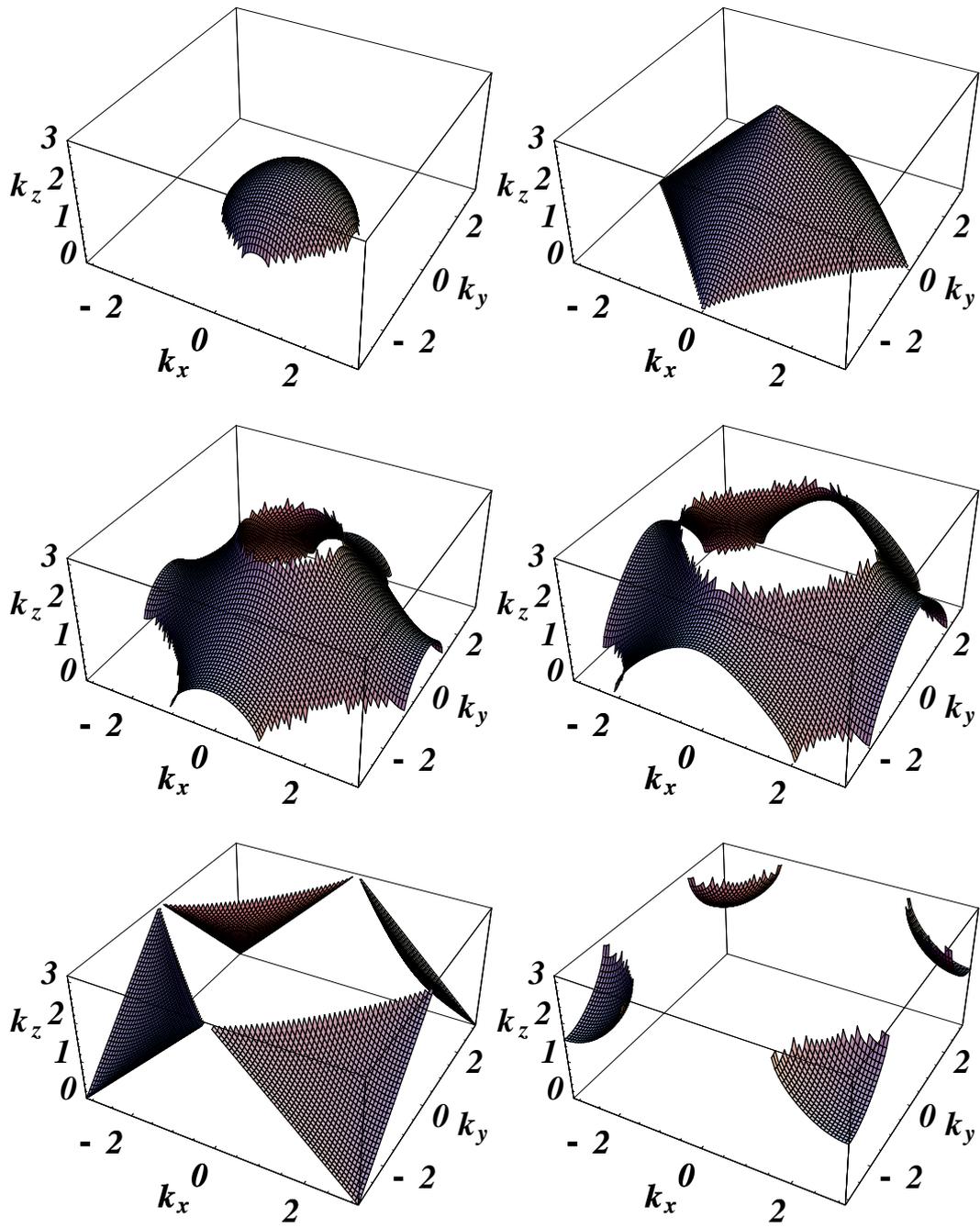


FIGURE 7.10 – Surfaces d'énergie constante du modèle de cubium avec $\mathcal{E}_0 = 0$, $\gamma = -0.5$ et $a = 1$ pour les énergies $\mathcal{E} = -2, -1, -0.5, 0.5, 1, 2$. Seul le domaine $k_z \geq 0$ de la première zone de Brillouin est représenté.

7.8.6 Points critiques et relations de Morse

Du fait de la périodicité des bandes d'énergies dans le réseau réciproque, il est possible d'établir des relations entre ces points critiques. Par exemple à une dimension, en conséquence du théorème de Rolle nous pouvons en déduire immédiatement qu'il existe au moins deux points critiques non équivalents dans la première zone de Brillouin, associés respectivement à un minimum et un maximum de l'énergie.

van Hove (1953) a montré que le nombre minimal de points critiques N_n de type M_n non équivalents dans la première zone de Brillouin à d dimensions est égal au nombre de Betti b_d^n

$$N_n \geq b_d^n. \quad (7.176)$$

Le nombre de Betti, donné par la formule

$$b_d^n = \frac{d!}{n!(d-n)!}, \quad (7.177)$$

est le nombre maximum de types de surfaces fermées à n dimensions, qui ne peuvent pas être déformées continûment les unes dans les autres tout en restant dans l'espace à d dimensions. Par exemple, la zone de Brillouin d'un réseau carré à deux dimensions est topologiquement équivalente à un tore. Ainsi les nombres de Betti sont $b_2^0 = 1$ (un seul type de points), $b_2^1 = 2$ (deux types de courbes fermées) et $b_2^2 = 1$ (un seul type de surface).

Plus généralement, par des considérations topologiques, nous pouvons également montrer les relations de Morse

$$N_0 \geq 1, N_1 - N_0 \geq 2, N_2 - N_1 + N_0 \geq 1, N_3 - N_2 + N_1 - N_0 = 0. \quad (7.178)$$

Cette discussion met en évidence le fait que l'existence de singularités dans la densité d'états est une conséquence directe de la périodicité donc de l'hypothèse de cristal parfait. Les fluctuations thermiques ou l'introduction de désordre ont pour effet de lisser les points anguleux dans la densité d'états.

Chapitre 8

Approximation Hartree-Fock

Sommaire

8.1	Introduction	201
8.2	Corrélation de Pauli et méthodes d'approximation en physique nucléaire	202
8.3	Approximation Hartree-Fock	204
8.4	Application à la description de l'écorce d'une étoile à neutrons	208
8.5	Intéraction phénoménologique de type Skyrme	210

8.1 Introduction

La résolution du problème à N corps dans l'écorce d'une étoile à neutrons à partir de la seule donnée de l'interaction entre nucléons libres est actuellement hors de portée. La difficulté tient notamment dans la présence de nombreuses inhomogénéités, pour lesquelles les équations de Schrödinger même les plus simples n'ont en général pas de solutions analytiques. C'est pourquoi, les approches les plus réalistes ont reposé jusqu'à maintenant sur des approximations de champs moyens dans lesquelles les nucléons (pour la méthode Hartree-Fock) ou des « quasinucléons » (pour la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov) sont traités comme des particules indépendantes plongées dans un champ moyen (en première lecture, voir par exemple le cours très pédagogique de Berger (1991) ; pour une approche plus approfondie voir par exemple Ring & Schuck (1980)). Dans ces approches, les effets de milieu sont pris en compte de façon phénoménologique par l'introduction d'interactions nucléons-nucléons effectives qui dépendent de la densité. Les paramètres de ces interactions sont en général ajustés sur les propriétés de quelques noyaux et de la matière nucléaire infinie.

Nous commencerons par donner quelques éléments de justification à une approche de champ moyen en discutant des corrélations introduites par le principe de Pauli dans le modèle du gaz de Fermi. Nous présenterons ensuite les équations Hartree-Fock et nous

étudierons plus en détail les équations obtenues avec une interaction effective de type Skyrme.

8.2 Corrélation de Pauli et méthodes d'approximation en physique nucléaire

Une approximation de particules indépendantes pour décrire les nucléons semble a priori très mauvaise, étant données les interactions très fortes entre les nucléons. Néanmoins nous devons garder à l'esprit deux éléments essentiels, d'une part la très courte portée des interactions nucléaires et d'autre part le principe d'exclusion de Pauli.

Considérons tout d'abord le modèle le plus simple qui soit, la modèle du gaz de Fermi que nous avons déjà abordé au chapitre 7. Les particules dans ce modèle ne sont soumises à aucune force (le potentiel est donc constant). Elles ne sont pas pour autant complètement indépendantes, en raison du principe de Pauli. Pour s'en convaincre, calculons la densité de probabilité de trouver simultanément une particule en \mathbf{r}_1 et une particule en \mathbf{r}_2 . Cette probabilité est proportionnelle à la fonction de corrélation $G\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}$ définie par la trace de la matrice densité à deux corps

$$\Gamma\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2\} \equiv \frac{N(N-1)}{2} \int \Psi^*\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N\} \Psi\{\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N\} d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N, \quad (8.1)$$

$$G\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\} \equiv \Gamma\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}. \quad (8.2)$$

En écrivant la fonction d'onde à N particules comme un simple produit de fonctions d'onde à une particule orthonormées

$$\Psi\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\} = \varphi_1\{\mathbf{r}_1\} \dots \varphi_N\{\mathbf{r}_N\}, \quad (8.3)$$

la fonction de corrélation (8.2) se réduit simplement au produit du nombre de paires multiplié par le produit des densités de particule

$$G\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\} = \frac{N(N-1)}{2} |\varphi_1\{\mathbf{r}_1\}|^2 |\varphi_2\{\mathbf{r}_2\}|^2. \quad (8.4)$$

Dans le cas de la matière nucléaire homogène, la densité est simplement constante $n\{\mathbf{r}\} = n$ et les fonctions d'onde à une particule sont des ondes planes du type (7.129). La fonction de corrélation se simplifie alors (dans la limite thermodynamique) sous la forme

$$G\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\} = \frac{1}{2} n^2. \quad (8.5)$$

Autrement dit la probabilité de trouver une particule en \mathbf{r}_1 et une particule en \mathbf{r}_2 est indépendante de la position des particules. Les particules ne sont donc pas corrélées.

Le principe de Pauli impose en revanche que la fonction d'onde à N fermions soit impaire dans l'échange de deux quelconques particules (voir la discussion de la section 7.4). La fonction d'onde Ψ s'écrit sous la forme d'un déterminant de Slater

$$\Psi\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\{\varphi_\alpha\{\mathbf{r}_\beta\}\}, \quad \alpha, \beta = 1 \dots N \quad (8.6)$$

en rétablissant explicitement les nombres quantiques α . Pour les simplifications algébriques, la fonction d'onde totale peut aussi s'écrire en notations tensorielles

$$\Psi\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \epsilon^{\alpha_1 \dots \alpha_N} \varphi_{\alpha_1}\{\mathbf{r}_1\} \dots \varphi_{\alpha_N}\{\mathbf{r}_N\}, \quad (8.7)$$

où les indices $\alpha_1 \dots \alpha_N$ varient de 1 à N et $\epsilon^{\alpha_1 \dots \alpha_N}$ est le symbole de Lévi-Civita à N dimensions. La fonction de corrélation associée n'est alors plus simplement le produit des densités mais se met sous la forme

$$2G\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\} = n\{\mathbf{r}_1\}n\{\mathbf{r}_2\} - \gamma\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}\gamma\{\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1\}. \quad (8.8)$$

La fonction $\gamma\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}$ est la matrice densité à un corps définie par

$$\gamma\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1\} \equiv N \int \Psi^*\{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\} \Psi\{\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}_N\} d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N, \quad (8.9)$$

qui se simplifie dans le cas présent sous la forme

$$\gamma\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\} = \sum_{\alpha=1}^N \varphi_\alpha^*\{\mathbf{r}_1\} \varphi_\alpha\{\mathbf{r}_2\}, \quad (8.10)$$

dont la trace est simplement la densité $\gamma\{\mathbf{r}, \mathbf{r}\} = n\{\mathbf{r}\}$. Dans le cas de la matière nucléaire homogène, la matrice densité (8.10) est donnée par (en supposant la matière non polarisée)

$$\gamma\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2}, \quad (8.11)$$

soit en développant les ondes planes en fonctions de Bessel sphériques

$$\gamma\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\} = \frac{k_F^3}{\pi^2} \frac{j_1\{k_F|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|\}}{k_F|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (8.12)$$

avec le vecteur d'onde de Fermi k_F défini par

$$\mathcal{E}_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^\oplus}. \quad (8.13)$$

En posant $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ et avec $n = k_F^3/3\pi^2$, nous trouvons l'expression

$$G\{r\} = \frac{1}{2} n^2 \left(1 - 9 \left(\frac{j_1\{k_F r\}}{k_F r} \right)^2 \right). \quad (8.14)$$

Cette fonction de corrélation est essentiellement constante (avec quelques fluctuations) à l'exception du domaine $k_F r \lesssim 4$, appelé le trou de Fermi. Ainsi la probabilité de trouver de particules à une distance inférieure à $r \lesssim 4/k_F$ est réduite de façon significative par rapport à la limite classique $r \rightarrow +\infty$, et ce d'autant plus que la dégénérescence est faible (la dégénérescence a pour effet de contrebalancer la répulsion induite par le principe de Pauli puisque rien n'interdit alors g particules d'avoir la même énergie). La corrélation introduite par l'antisymétrisation de la fonction d'onde Ψ est un peu particulière en ce sens qu'elle ne résulte pas des interactions entre les particules mais de leur nature fermionique et du principe de Pauli. La taille du trou de Fermi est de l'ordre de 2 fm environs à la densité de saturation ce qui est à peu près du même ordre de grandeur que la portée des interactions nucléaires. C'est la raison pour laquelle les nucléons dans le noyau se comportent comme des particules approximativement indépendantes, dont une des manifestations est l'existence de nombres magiques.

Ce raisonnement très simple est le fondement des méthodes perturbatives pour le traitement du problème à N corps dans la matière nucléaire infinie diluée, initié dans les années 1950, notamment par Brueckner. Le paramètre du développement perturbatif est $k_F r_c$, où $r_c \simeq 0.4$ fm est le rayon du coeur répulsif de l'interaction nucléon-nucléon. Néanmoins, la convergence du développement perturbatif est très lente pour la matière nucléaire dans les noyaux parce que ce système est relativement dense dans le sens où $k_F r_c \lesssim 1$. Il est par conséquent techniquement très difficile de reproduire les propriétés des noyaux en s'appuyant uniquement sur une interaction entre nucléons dans le vide. C'est pour cette raison que des interactions phénoménologiques ont été développées de façon à décrire les interactions entre nucléons dans le milieu nucléaire. D'ailleurs même dans le cadre des calculs microscopiques, il est nécessaire d'introduire une contribution empirique à l'interaction de courte portée du fait que les nucléons ne sont pas des particules élémentaires mais sont composés de quarks.

8.3 Approximation Hartree-Fock

8.3.1 Principe variationnel

Considérons un ensemble de A nucléons en interactions. Nous supposons que les nucléons sont décrits par un Hamiltonien du type

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^A \frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^A \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)} \quad (8.15)$$

dans lequel, $v_{\alpha\beta}^{(2)}$ désigne une interaction effective à deux corps. Dans l'approximation de particules indépendantes, nous recherchons des solutions de la forme d'un déterminant de Slater

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det\{\varphi_{\alpha}\{\xi_{\beta}\}\} \quad (8.16)$$

où ξ_β représente l'ensemble des coordonnées spatiales, de spin et d'isospin de la particule β . Nous supposons de plus que les fonctions d'ondes φ_α sont orthonormées

$$\langle \varphi_\alpha | \varphi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}, \quad (8.17)$$

de telle sorte que la fonction d'onde totale Ψ est normée

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1. \quad (8.18)$$

D'après le théorème de Ritz (voir par exemple Cohen-Tannoudji *et al.* (1998)), les fonctions d'ondes à une particule φ qui donnent la meilleure approximation à l'état fondamental Ψ sont celles qui minimisent l'énergie totale définie par

$$E_{\text{tot}} \equiv \frac{\langle \Psi | \hat{H} \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (8.19)$$

avec la contrainte (8.18) que la fonction d'onde Ψ soit normée.

En utilisant (8.15), (8.16) et (8.17), nous avons

$$E_{\text{tot}} = \sum_{\alpha=1}^A \langle \varphi_\alpha | \frac{\hat{p}_\alpha^2}{2m} \varphi_\alpha \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^A \left(\langle \varphi_\alpha \varphi_\beta | \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)} \varphi_\alpha \varphi_\beta \rangle - \langle \varphi_\alpha \varphi_\beta | \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)} \varphi_\beta \varphi_\alpha \rangle \right). \quad (8.20)$$

Nous devons donc minimiser la quantité \tilde{E}_{tot} , définie par

$$\tilde{E}_{\text{tot}} \equiv E_{\text{tot}} - \sum_{\alpha,\beta=1}^A \lambda_{\alpha\beta} (\langle \varphi_\alpha | \varphi_\beta \rangle - \delta_{\alpha\beta}) \quad (8.21)$$

pour des variations arbitraires des fonctions d'ondes φ_α . Les nombres $\lambda_{\alpha\beta}$ sont des multiplicateurs de Lagrange. Nous obtenons ainsi des équations pour les fonctions d'onde à une particule ¹

$$\frac{\delta \tilde{E}_{\text{tot}}}{\delta \varphi_\alpha^*} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, A \quad (8.22)$$

$$\frac{\delta \tilde{E}_{\text{tot}}}{\delta \varphi_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, A. \quad (8.23)$$

Ces conditions se traduisent par des équations de type Schrödinger pour les fonctions d'onde à une particule. Comme les fonctions d'ondes d'un opérateur hermitique peuvent toujours être orthonormalisées, il nous suffit d'imposer la contrainte que les fonctions d'ondes soient normées, ce qui revient à minimiser la quantité

$$\tilde{E}_{\text{tot}} = E_{\text{tot}} - \sum_{\alpha=1}^A \mathcal{E}_\alpha (\langle \varphi_\alpha | \varphi_\alpha \rangle - 1). \quad (8.24)$$

¹Les fonctions d'ondes étant complexes, nous devons avoir $2A$ équations.

En remarquant que \tilde{E}_{tot} est réelle, nous voyons que certaines conditions sont redondantes. Nous pouvons donc nous restreindre aux conditions (8.22) qui s'écrivent sous la forme d'équations de type Schrödinger avec un Hamiltonien effectif \hat{H}_α

$$\hat{H}_\alpha \varphi_\alpha = \mathcal{E}_\alpha \varphi_\alpha, \quad (8.25)$$

avec

$$\hat{H}_\alpha \equiv \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U}_{\text{DIR}} + \hat{U}_{\text{ECH}} + \hat{U}_{\text{REA}}. \quad (8.26)$$

Les multiplicateurs de Lagrange \mathcal{E}_α s'interprètent comme les énergies à une particule. Les opérateurs qui apparaissent dans les A équations Hartree-Fock (8.25) résultent des interactions moyennées entre tous les nucléons et sont donc appelés des opérateurs de champ moyen. Le champ direct \hat{U}_{DIR} et le champ d'échange \hat{U}_{ECH} , définis par¹

$$\hat{U}_{\text{DIR}} \varphi_\alpha = \sum_{\beta=1}^A \langle \varphi_\beta | \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)} | \varphi_\alpha \varphi_\beta \rangle \quad (8.27)$$

$$\hat{U}_{\text{ECH}} \varphi_\alpha = - \sum_{\beta=1}^A \langle \varphi_\beta | \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)} | \varphi_\beta \varphi_\alpha \rangle \quad (8.28)$$

sont bien connus en physique du solide pour la description des électrons de conduction. Le terme direct s'interprète comme le potentiel engendré par tous les nucléons. Le terme d'échange est d'origine purement quantique puisqu'il résulte du principe de Pauli par l'antisymétrisation de la fonction d'onde totale Ψ . Le champ d'échange n'est pas local en général. Autrement dit \hat{U}_{ECH} est un opérateur intégral. Le champ de réarrangement \hat{U}_{REA} provient directement de la dépendance de l'interaction effective $\hat{v}^{(2)}$ dans la densité de particules $n\{\mathbf{r}\}$ définie par

$$n\{\mathbf{r}\} = \sum_{\alpha=1}^A |\varphi_\alpha\{\mathbf{r}\}|^2. \quad (8.29)$$

L'opérateur correspondant, défini par

$$\hat{U}_{\text{REA}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^A \left(\langle \varphi_\alpha \varphi_\beta | \frac{\delta \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)}}{\delta n} | \varphi_\alpha \varphi_\beta \rangle - \langle \varphi_\alpha \varphi_\beta | \frac{\delta \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)}}{\delta n} | \varphi_\beta \varphi_\alpha \rangle \right), \quad (8.30)$$

représente les effets de milieu associés notamment aux interactions à trois corps entre les nucléons. Le champ de réarrangement est en général absent en physique du solide dans l'approximation Hartree-Fock, puisque les interactions électromagnétiques entre les électrons sont bien connues et sont indépendantes de la densité. Néanmoins, ce champ est indirectement présent dans le cadre plus général de la théorie de la fonctionnelle de densité. En vertu du théorème de Hohenberg & Kohn (1964), l'énergie totale de l'état

¹De façon plus explicite, $\langle \varphi_\beta | \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)} | \varphi_\alpha \varphi_\beta \rangle = \int d\xi' \varphi_\beta\{\xi'\}^* \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)}\{\xi, \xi'\} \varphi_\alpha\{\xi\} \varphi_\beta\{\xi'\}$, où l'intégrale signifie ici la sommation sur toutes les coordonnées ξ (variables d'espace, de spin, d'isospin).

fondamental est une fonctionnelle unique de la densité. Contrairement aux méthodes de champs moyens avec une interaction effective, développées en physique nucléaire, la théorie de la fonctionnelle de densité consiste à supposer directement une certaine expression de l'énergie totale comme une fonctionnelle de la densité et de ses gradients. Remarquons que cette approche a également été suivie en physique nucléaire, depuis les travaux précurseurs de Negele & Vautherin (1972,1975).

Les expressions des opérateurs de champ moyen montrent que les A équations Hartree-Fock sont couplées et doivent donc être résolues simultanément. De plus, chacune de ces équations est non linéaire et n'est donc pas strictement une équation aux valeurs propres. Ces équations sont résolues par itération à partir d'un ensemble donné de A fonctions d'onde à une particule $\{\varphi_\alpha\}$. A chaque pas, les solutions sont réinjectées dans les expressions des opérateurs de champ moyen jusqu'à ce que la convergence soit atteinte.

8.3.2 Ansatz de Fermi

Un point qui est rarement discuté dans les ouvrages standards sur le sujet, autant en physique nucléaire qu'en physique du solide, concerne le calcul des opérateurs de champ moyen. En effet, les équations de Hartree-Fock (8.25) admettent en général un nombre infini de solutions et la détermination du champ moyen nécessite donc de sélectionner certains de ces états, plus précisément seulement A états. Mathématiquement, le choix de ces états n'est pas arbitraire mais déterminé par la méthode variationnelle que nous avons suivie. En effet, nous avons vu que la meilleure approximation pour l'état fondamental Ψ de l'ensemble des A nucléons est celui qui minimise l'énergie totale. Par conséquent, les états à une particule qui sont utilisés pour recalculer les opérateurs de champ moyen doivent donc être choisis de façon à minimiser l'énergie totale. Cette procédure est néanmoins extrêmement compliquée puisque l'énergie totale n'est pas simplement la somme des énergies individuelles comme dans le modèle de gaz de Fermi (voir la discussion de la section 7.7). En effet, en utilisant les relations (8.17) d'orthonormalisation des fonctions d'onde à une particule, nous avons d'après l'équation aux valeurs propres (8.25)

$$\mathcal{E}_\alpha = \langle \varphi_\alpha | \frac{\hat{p}_\alpha^2}{2m} \varphi_\alpha \rangle + \sum_{\beta=1}^A \left(\langle \varphi_\alpha \varphi_\beta | \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)} \varphi_\alpha \varphi_\beta \rangle - \langle \varphi_\alpha \varphi_\beta | \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)} \varphi_\beta \varphi_\alpha \rangle \right) + \langle \varphi_\alpha | \hat{U}_{\text{REA}} \varphi_\alpha \rangle. \quad (8.31)$$

En sommant sur α , et en comparant avec l'expression (8.20), il est facile de voir que l'énergie totale s'exprime en fonction des énergies à une particule sous la forme

$$E_{\text{tot}} = \sum_{\alpha=1}^A \mathcal{E}_\alpha - \delta E, \quad (8.32)$$

avec

$$\delta E = \sum_{\alpha=1}^A \frac{1}{2} \left(\langle \varphi_\alpha | \hat{U}_{\text{DIR}} \varphi_\alpha \rangle + \langle \varphi_\alpha | \hat{U}_{\text{ECH}} \varphi_\alpha \rangle \right) + \sum_{\alpha=1}^A \langle \varphi_\alpha | \hat{U}_{\text{REA}} \varphi_\alpha \rangle. \quad (8.33)$$

En pratique, l'hypothèse très souvent implicite est de supposer que l'énergie totale est minimale pour une distribution de Fermi des états à une particule, comme pour le gaz de Fermi ou le modèle en couches. Cette hypothèse consiste à ne retenir, à chaque pas d'itération, que les états à une particule qui ont les énergies \mathcal{E}_α les plus basses.

Il est important de souligner que cet ansatz de Fermi revient à négliger dans la procédure de minimisation les termes d'énergie δE qui peuvent être positifs ou négatifs. Cette approximation se traduit dans certains cas par une perte de convergence des équations Hartree-Fock (pour une discussion de ce problème en physique du solide, voir Koelling (1981)). Nous pouvons néanmoins espérer que cette approximation ne soit pas trop mauvaise lorsque le nombre de nucléons est suffisamment large et que les états à une particule sont délocalisés (en se rappelant que le remplissage des états par l'ansatz de Fermi est exact dans la limite du gaz de Fermi). Remarquons au passage que l'équation (8.32) peut s'écrire sous la forme

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2}(E_{\text{CIN}} + \sum_{\alpha=1}^A \mathcal{E}_\alpha) + E_{\text{REA}}, \quad (8.34)$$

en notant E_{CIN} l'énergie cinétique et E_{REA} l'énergie de réarrangement définies respectivement par

$$E_{\text{CIN}} \equiv \sum_{\alpha=1}^A \langle \varphi_\alpha | \frac{\hat{p}_\alpha^2}{2m} \varphi_\alpha \rangle, \quad E_{\text{REA}} \equiv \sum_{\alpha=1}^A \langle \varphi_\alpha | \hat{U}_{\text{REA}} \varphi_\alpha \rangle. \quad (8.35)$$

8.4 Application à la description de l'écorce d'une étoile à neutrons

8.4.1 Conditions aux limites

Jusqu'à présent, nous n'avons pas précisé les conditions aux limites à appliquer pour résoudre les équations Hartree-Fock (8.25). Pour le traitement des nucléons dans l'écorce d'une étoile à neutrons, nous supposons qu'il existe une symétrie cristalline de telle sorte que les différentes contributions du champ moyen sont périodiques

$$\hat{U}_{\text{DIR}}\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = \hat{U}_{\text{DIR}}\{\mathbf{r}\}, \quad \hat{U}_{\text{ECH}}\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = \hat{U}_{\text{ECH}}\{\mathbf{r}\}, \quad \hat{U}_{\text{REA}}\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = \hat{U}_{\text{REA}}\{\mathbf{r}\} \quad (8.36)$$

$\mathbf{T} = \ell^a \mathbf{e}_a$ représentant n'importe quel vecteur de translation d'un réseau cristallin.

Nous avons vu au chapitre 7, que les états propres de l'Hamiltonien effectif correspondant sont dans ce cas, d'après le théorème de Floquet-Bloch, des ondes planes modulées

$$\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} = u_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (8.37)$$

où l'amplitude de l'onde plane est périodique

$$u_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = u_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}. \quad (8.38)$$



FIGURE 8.1 – Eugène Paul Wigner (1902-1995), prix Nobel de physique 1963 et Frederick Seitz (1911-).

Ce théorème implique que nous pouvons résoudre les équations Hartree-Fock dans une seule maille élémentaire du cristal, en imposant que la fonction d'onde entre deux faces opposées, séparées par un vecteur de translation \mathbf{T} , est déphasée de la façon suivante :

$$\varphi_{\mathbf{ak}}\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = \varphi_{\mathbf{ak}}\{\mathbf{r}\}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}}. \quad (8.39)$$

8.4.2 Approximation de Wigner-Seitz

Depuis les travaux pionnier de Negele & Vautherin (1973) jusqu'aux calculs les plus récents de Sandulescu *et al.* (2004), les équations de champ moyen (ou des équations de Schrödinger plus ou moins phénoménologiques) ont été résolues dans l'approximation de Wigner & Seitz (1933)¹, qui consiste à remplacer la maille élémentaire, qui est un polyèdre en général, par une sphère de même volume. La simplification est significative puisque les équations Hartree-Fock se réduisent ainsi à des équations différentielles ordinaires pour la seule coordonnée radiale. En outre, les conditions aux limites de Bloch sont remplacées par des conditions plus ou moins arbitraires sur la sphère. Par exemple, la prescription de Negele & Vautherin (1973) est d'imposer que la fonction d'onde radiale associée à un nombre quantique orbital pair s'annule et pour un nombre quantique orbital impair, c'est la dérivée de la fonction d'onde radiale qui est égale à zéro. Montani *et al.* (2004) ont simplement imposé que la fonction d'onde s'annule sur la sphère.

L'approximation de W-S revient à ne considérer que la symétrie locale des noyaux (symétrie sphérique) et à négliger la symétrie de translation. Autrement dit cette approximation traite les noyaux comme s'ils étaient isolés. Cette approximation est justifiée dans l'écorce d'une étoile à neutrons pour les nucléons confinés à l'intérieur des noyaux. En effet comme les états à une particule sont liés, les fonctions d'ondes correspondantes sont essentiellement nulles à l'extérieur des noyaux et ne sont donc pas très sensibles aux conditions aux limites. En revanche, l'approximation de W-S devient douteuse pour décrire les neutrons de conduction dans l'écorce interne puisque ces derniers sont complètement délocalisés.

¹Cette approximation semble avoir été proposée indépendamment par Frenkel (1928).

D'ailleurs, dans cette approximation la densité de neutrons est habituellement moyennée au voisinage des bords de la sphère, de façon à éliminer les fluctuations non physiques introduites par ces conditions aux limites comme l'illustre la figure 8.2. Dans la théorie des bandes, la densité locale de neutrons

$$n_n\{\mathbf{r}\} = \frac{g}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int_{\text{ZB}} d^3k |\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}|^2 \vartheta\{\mu - \mathcal{E}_{\alpha}\{\mathbf{k}\}\}, \quad (8.40)$$

avec la normalisation

$$\frac{1}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} d^3\mathbf{r} |\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}|^2 = 1, \quad (8.41)$$

possède toutes les symétries du cristal par l'unitarité des représentations du groupe d'espace, et il n'est donc pas nécessaire d'imposer des conditions *ad hoc* supplémentaires. Cela signifie en particulier que le gradient de la densité $\nabla n_n\{\mathbf{T}\}$ est nul lorsque le cristal est invariant par inversion spatiale. Par conséquent, la densité est constante au premier ordre à l'intérieur des noyaux. Lorsque \mathbf{r} appartient à un plan de symétrie, le gradient de la densité est également dans le plan. La densité est donc constante au premier ordre au voisinage des bords de la cellule de W-S, le long de directions perpendiculaires aux faces de la cellule lorsque celles-ci sont parallèles à des plans de symétrie. Ceci est vrai pour toutes les faces de la cellule de W-S d'un réseau cubique à l'exception des faces hexagonales pour le réseau cubique centré.

Plus récemment, Magierski *et al.* (2003) ont suggéré que les effets de couches issus des neutrons libres, qui sont négligés dans l'approximation de W-S, pourraient être importants. Ils ont ainsi effectué un calcul Hartree-Fock à trois dimensions avec une interaction effective de type Skyrme et des conditions aux limites strictement périodiques dans un cube. Néanmoins ces conditions aux limites, bien qu'elles ne traitent plus les noyaux comme isolés, ne sont qu'un cas particulier des conditions de Bloch, à savoir celles associées à un vecteur d'onde nul $\mathbf{k} = 0$ (origine de la première zone de Brillouin) pour lequel les fonctions ne sont pas déphasées d'une maille à une autre. En outre, le choix d'une cellule cubique pour imposer les conditions aux limites n'est valide dans la théorie des bandes, que pour un réseau cubique simple. Par exemple, nous avons vu précédemment, que la cellule de W-S d'un réseau cubique à faces centrées est un dodécaèdre régulier¹.

Nous insistons sur le fait que l'introduction des conditions aux limites de Bloch nécessite la résolution d'une équation aux dérivées partielles à trois dimensions, pour *tous* les vecteurs d'onde \mathbf{k} dans un domaine irréductible de la première zone de Brillouin.

8.5 Interaction phénoménologique de type Skyrme

En conséquence de la portée finie des interactions entre nucléons, le champ moyen d'échange \hat{U}_{ECH} est non local. Ceci rend la résolution des équations Hartree-Fock numériquement très lourde. C'est pourquoi des interactions de portée nulle ont été proposées. Les

¹La cellule de W-S d'un réseau cubique à faces centrées correspond à la première zone de Brillouin d'un réseau cubique centré.

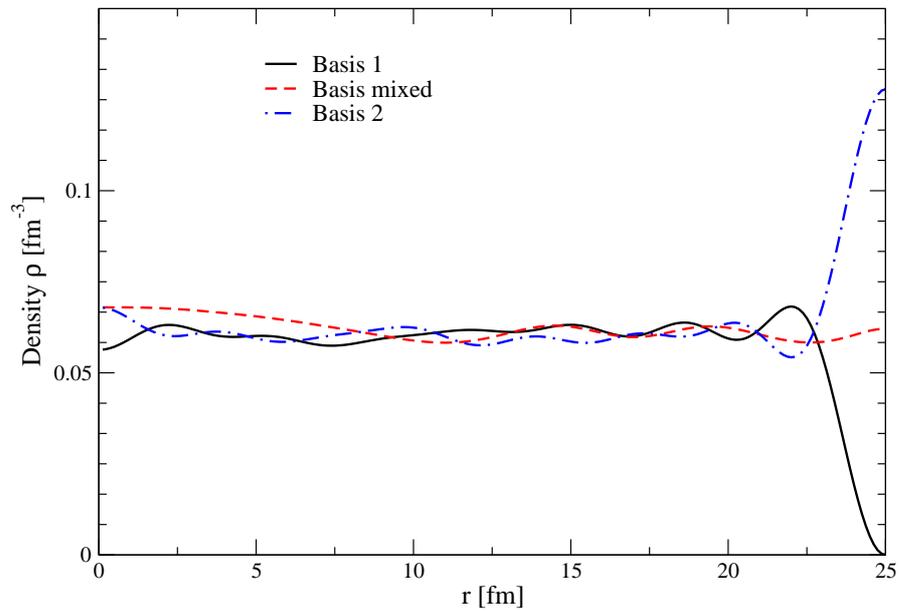


FIGURE 8.2 – Différentes conditions aux limites dans l’approximation de W-S pour la matière homogène de densité $\rho = 0.06 \text{ fm}^{-3}$: le choix 1 consiste à imposer que la fonction d’onde radiale s’annule sur la sphère, le choix 2 que la dérivée de la fonction d’onde radiale s’annule et enfin le choix mixte est la prescription de Negele et Vautherin selon laquelle la fonction d’onde avec un nombre quantique orbital l est nulle et la dérivée de la fonction d’onde radiale doit être nulle pour l impair. Source : Montani *et al.* (2004).

effets liés à la portée finie des interactions nucléaires sont alors simulés par une dépendance de l'interaction effective $\hat{v}^{(2)}$ dans les impulsions des deux nucléons.

En particulier, les interactions de Skyrme sont des forces de contact, paramétrées par une expression du type

$$\begin{aligned} \hat{v}^{(2)}\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\} = & t_0(1+x_0\hat{P}^\sigma)\delta\{\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\} + \frac{1}{2}t_1(1+x_1\hat{P}^\sigma) \left((\hat{\mathbf{p}}^\dagger/\hbar)^2\delta\{\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\} + \delta\{\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\}(\hat{\mathbf{p}}/\hbar)^2 \right) \\ & + t_2(1+x_2\hat{P}^\sigma)(\hat{\mathbf{p}}^\dagger/\hbar) \cdot \delta\{\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\}(\hat{\mathbf{p}}/\hbar) + \frac{1}{6}t_3(1+x_3\hat{P}^\sigma)n_b\{(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)/2\}^\gamma\delta\{\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\} \\ & + iW_0(\sigma_1+\sigma_2) \cdot \hat{\mathbf{p}}^\dagger/\hbar \times \delta\{\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\}\hat{\mathbf{p}}/\hbar \quad (8.42) \end{aligned}$$

Le vecteur de type σ a pour composantes les matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8.43)$$

Nous avons également introduit l'opérateur d'échange de spin \hat{P}^σ donné par la formule

$$\hat{P}^\sigma = \frac{1}{2}(1 + \sigma_1 \cdot \sigma_2) \quad (8.44)$$

et l'opérateur impulsion relative $\hat{\mathbf{p}}$ défini par

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{2i}(\nabla_1 - \nabla_2). \quad (8.45)$$

Vautherin & Brink (1972) ont montré que le terme dépendant de la densité avec $\gamma = 1$ et $x_3 = 0$ (paramétrisations SI et SII), était équivalent à une interaction effective à trois corps de la forme

$$v^{(3)}\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3\} = t_3 \delta\{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\}\delta\{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3\}, \quad (8.46)$$

pour des noyaux pair-pair (avec un nombre pair de neutrons et un nombre pair de protons), et plus généralement pour des configurations invariantes par renversement du temps. L'introduction d'une dépendance en densité dans l'interaction effective à deux corps (8.42), permet ainsi de reproduire des effets de milieu. Depuis, d'autres paramétrisations avec $1/6 \leq \gamma \leq 1/3$ ont été proposées de façon à améliorer la valeur du module d'incompressibilité de la matière nucléaire symétrique infinie.

En supposant que l'état Ψ est invariant par renversement du temps (c'est le cas des noyaux pair-pair) et que protons et neutrons ne se superposent pas, le champ moyen déduit des interactions de Skyrme est une fonctionnelle des densités locales de nucléons

$$n_q\{\mathbf{r}\} = \sum_{\alpha} |\varphi_{\alpha}^{(q)}\{\mathbf{r}\}|^2, \quad (8.47)$$

des densités cinétiques

$$\tau_q\{\mathbf{r}\} = \sum_{\alpha} |\nabla\varphi_{\alpha}^{(q)}\{\mathbf{r}\}|^2, \quad (8.48)$$

et des densités vectorielles de spin (la multiplication matricielle dans l'espace de spin étant implicite)

$$\mathbf{J}_q\{\mathbf{r}\} = - \sum_{\alpha} \varphi_{\alpha}^{(q)}\{\mathbf{r}\}^* \cdot \sigma \times \nabla \varphi_{\alpha}^{(q)}\{\mathbf{r}\}. \quad (8.49)$$

Lorsque l'état Ψ n'est pas invariant par renversement du temps, par exemple pour des noyaux en rotations ou des noyaux avec un nombre impair de neutrons et un nombre impair de protons, le champ moyen contient des termes supplémentaires (voir Bender *et al.* (2003) et les références citées.).

Les différentes composantes du champ moyen, pour un nucléon de type $q = n, p$ sont données par

$$\begin{aligned} U_{\text{DIR}}\{\mathbf{r}\} = & -\nabla \frac{1}{8} n_b\{\mathbf{r}\} (t_1(2+x_1) + t_2(2+x_2)) \cdot \nabla \\ & + \frac{1}{2} t_0(2+x_0) n_b\{\mathbf{r}\} + \frac{1}{8} (t_1(2+x_1) + t_2(2+x_2)) \tau_b\{\mathbf{r}\} + \frac{1}{16} (t_2(2+x_2) - 3t_1(2+x_1)) \nabla^2 n_b\{\mathbf{r}\} \\ & - i \left(\frac{1}{2} W_0 \nabla n_b\{\mathbf{r}\} - \frac{1}{8} (t_1 x_1 + t_2 x_2) \mathbf{J}\{\mathbf{r}\} \right) \cdot \nabla \times \sigma, \quad (8.50) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\text{ECH}}\{\mathbf{r}, \mathbf{r}'\} = & \delta\{\mathbf{r} - \mathbf{r}'\} \left[\nabla \frac{1}{8} n_q\{\mathbf{r}\} (t_1(1+2x_1) + t_2(1+2x_2)) \cdot \nabla - \frac{1}{2} t_0(1+2x_0) n_q\{\mathbf{r}\} \right. \\ & + \frac{1}{8} (t_2(2x_2+1) - t_1(2x_1+1)) \tau_q\{\mathbf{r}\} + \frac{1}{16} (3t_1(2x_1+1) + t_2(2x_2+1)) \nabla^2 n_q\{\mathbf{r}\} \\ & \left. - \frac{1}{2} W_0 \nabla \cdot \mathbf{J}_q\{\mathbf{r}\} - i \left(\frac{1}{2} W_0 \nabla n_q\{\mathbf{r}\} + \frac{1}{8} (t_1 - t_2) \mathbf{J}_q\{\mathbf{r}\} \right) \cdot \nabla \times \sigma \right], \quad (8.51) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_{\text{REA}}\{\mathbf{r}\} = & \frac{1}{24} t_3 \left[(2+x_3)(2+\gamma) n_b\{\mathbf{r}\}^{\gamma+1} \right. \\ & \left. - (2x_3+1) (2n_b\{\mathbf{r}\}^{\gamma} n_q\{\mathbf{r}\} + \gamma n_b\{\mathbf{r}\}^{\gamma-1} (n_n\{\mathbf{r}\}^2 + n_p\{\mathbf{r}\}^2)) \right]. \quad (8.52) \end{aligned}$$

Les termes proportionnels aux densités de spin \mathbf{J}_q ont été obtenus en supposant une symétrie axiale (voir Vautherin & Brink (1972) pour le calcul détaillé).

A cette interaction effective nucléaire (8.42), s'ajoute l'interaction Coulombienne à deux corps répulsive entre les protons qui contribue aux champs moyens direct et d'échange dans l'approximation Hartree-Fock. En négligeant les effets liés à la taille finie des protons, c'est-à-dire en assimilant la densité de charge à la densité de protons¹, l'interaction Coulombienne à deux corps se réduit à

$$\hat{v}_C^{(2)}\{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (8.53)$$

¹Ceci revient à traiter les protons comme des particules ponctuelles puisque la densité de protons n'est déterminée que par le nombre de protons.

et le champ moyen correspondant est donné par

$$\hat{V}_C \varphi_\alpha^{(p)} \{\mathbf{r}\} = e^2 \varphi_\alpha^{(p)} \{\mathbf{r}\} \int \frac{n_p \{\mathbf{r}'\}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r' - \sum_{\beta=1}^Z \varphi_\beta^{(p)} \{\mathbf{r}\} \int d^3 r' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_\beta^{(p)} \{\mathbf{r}'\}^* \varphi_\alpha^{(p)} \{\mathbf{r}'\}. \quad (8.54)$$

Le terme Coulombien d'échange est souvent traité dans l'approximation de Slater (1951), qui consiste à supposer que localement l'ensemble des protons forme un gaz de Fermi de même densité

$$\sum_{\beta=1}^Z \varphi_\beta^{(p)} \{\mathbf{r}\} \int d^3 r' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_\beta^{(p)} \{\mathbf{r}'\}^* \varphi_\alpha^{(p)} \{\mathbf{r}'\} \simeq e^2 \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} n_p \{\mathbf{r}\}^{1/3} \varphi_\alpha^{(p)} \{\mathbf{r}\}, \quad (8.55)$$

de telle sorte que les équations Hartree-Fock sont locales.

Les termes qui dépendent des impulsions (c'est-à-dire des gradients) dans le champ moyen conduisent à redéfinir l'opérateur cinétique, notamment en introduisant une masse effective microscopique. Traditionnellement, les équations Hartree-Fock déduites d'une interaction de Skyrme, sont ainsi réécrite sous la forme

$$\hat{H}_q \varphi_\alpha^{(q)} = \left[-\nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2m_q^\oplus \{\mathbf{r}\}} \nabla + U_q \{\mathbf{r}\} - i \mathbf{W}_q \{\mathbf{r}\} \cdot \nabla \times \sigma + \delta_{qp} \hat{V}_C \right] \varphi_\alpha^{(q)} = \mathcal{E}_\alpha \varphi_\alpha^{(q)}. \quad (8.56)$$

La masse effective microscopique de Skyrme est définie par

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^\oplus \{\mathbf{r}\}} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{8} n_b \{\mathbf{r}\} (t_1(2+x_1) + t_2(2+x_2)) - \frac{1}{8} n_q \{\mathbf{r}\} (t_1(1+2x_1) - t_2(1+2x_2)). \quad (8.57)$$

Le potentiel central et le couplage spin-orbit sont donnés par

$$\begin{aligned} U_q \{\mathbf{r}\} = & \frac{1}{2} t_0 ((2+x_0) n_b \{\mathbf{r}\} - (1+2x_0) n_q \{\mathbf{r}\}) \\ & + \frac{1}{24} t_3 [(2+x_3)(2+\gamma) n_b \{\mathbf{r}\}^{\gamma+1} - (2x_3+1) (2n_b \{\mathbf{r}\}^\gamma n_q \{\mathbf{r}\} + \gamma n_b \{\mathbf{r}\}^{\gamma-1} (n_n \{\mathbf{r}\}^2 + n_p \{\mathbf{r}\}^2))] \\ & + \frac{1}{8} (t_1(2+x_1) + t_2(2+x_2)) \tau_b \{\mathbf{r}\} + \frac{1}{8} (t_2(2x_2+1) - t_1(2x_1+1)) \tau_q \{\mathbf{r}\} \\ & + \frac{1}{16} (t_2(2+x_2) - 3t_1(2+x_1)) \nabla^2 n_b \{\mathbf{r}\} + \frac{1}{16} (3t_1(2x_1+1) + t_2(2x_2+1)) \nabla^2 n_q \{\mathbf{r}\} \\ & - \frac{1}{2} W_0 (\nabla \cdot \mathbf{J}_q \{\mathbf{r}\} + \nabla \cdot \mathbf{J} \{\mathbf{r}\}) \end{aligned} \quad (8.58)$$

$$\mathbf{W}_q \{\mathbf{r}\} = \frac{1}{2} W_0 (\nabla n_b \{\mathbf{r}\} + \nabla n_q \{\mathbf{r}\}) + \frac{1}{8} (t_1 - t_2) \mathbf{J}_q \{\mathbf{r}\} - \frac{1}{8} (t_1 x_1 + t_2 x_2) \mathbf{J} \{\mathbf{r}\}. \quad (8.59)$$

Lorsque la matière nucléaire est saturée en spin, les densités $\mathbf{J}_q\{\mathbf{r}\}$ sont simplement nulles. Même dans les cas où le milieu est polarisé, les termes contenant des densités de spin sont souvent négligés.

Plusieurs forces ont été proposées depuis les travaux précurseurs de Vautherin & Brink (1972), à mesure que les données expérimentales sur les noyaux se sont enrichies, notamment en ce qui concerne les noyaux fortement éloignés de la vallée de stabilité. Un progrès majeur fut réalisé par la mesure expérimentale des résonances géantes monopolaires isoscalaires (mode de respiration), qui permit de mieux contraindre le module d'incompressibilité de la matière nucléaire symétrique infinie. Les forces SkM de Krivine *et al.* (1980) furent ainsi ajustées sur ces nouvelles données. Bartel *et al.* (1982) proposèrent une nouvelle paramétrisation SkM* pour améliorer la description des propriétés de surface des noyaux, notamment des isomères de fission qui présente de larges déformations.

La paramétrisation RATP de Rayet *et al.* (1982) a été une des premières tentatives pour ajuster les forces de Skyrme à la matière de neutrons et fournir ainsi une paramétrisation adaptée aux applications astrophysiques, notamment l'étude de la matière nucléaire dans les étoiles à neutrons. Le groupe de Lyon (voir Chabanat (1995, 1997, 1998a, 1998b)) a proposée il y a quelques années un ensemble de paramétrisations de Skyrme conçues spécifiquement pour l'étude des étoiles à neutrons et des noyaux fortement enrichis en neutrons, en imposant parmi les contraintes que les forces reproduisent l'équation d'état de la matière pure de neutrons de Wiringa *et al.* (1988), tout en ajustant les forces sur les propriétés des noyaux et de la matière nucléaire symétrique.

Chapitre 9

Evaluation des coefficients d'entraînement

Sommaire

9.1	Description microscopique des neutrons	217
9.2	Etats d'équilibre	221
9.3	Détermination des coefficients d'entraînement	224
9.4	Application à la matière nucléaire homogène	227

En nous appuyant sur la théorie des bandes discutée dans le chapitre 7, nous allons montrer comment calculer les coefficients d'entraînement qui apparaissent dans une description macroscopique de l'écorce interne d'une étoile à neutrons basée sur le modèle à deux fluides décrit dans le chapitre 5.

9.1 Description microscopique des neutrons

9.1.1 Approximation de particules indépendantes

Du fait de la forte dégénérescence de la matière nucléaire, à la fois dans les noyaux et dans le gaz de neutrons, le principe de Pauli limite les processus de diffusion nucléon-nucléon. Le libre parcours moyen d'un nucléon est par conséquent très grand devant la portée des interactions nucléaires. C'est ce qui explique le succès du modèle de particules indépendantes dans les noyaux.

En supposant que l'écorce solide forme un cristal parfait, les neutrons peuvent donc être décrits en première approximation (dans le référentiel de l'écorce), par une fonction d'onde à N particules sous la forme d'un déterminant de Slater

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\{\varphi_\alpha\{\mathbf{r}_\beta\}\}, \quad \alpha, \beta = 1 \dots N \quad (9.1)$$

dans laquelle les fonctions d'ondes à une particule, φ_α , comme nous l'avons discuté précédemment au chapitre 7, sont des fonctions de Bloch

$$\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} = u_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (9.2)$$

où l'amplitude de l'onde plane possède la périodicité d'un réseau cristallin parfait

$$u_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = u_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}, \quad (9.3)$$

où \mathbf{T} est un vecteur de translation quelconque.

Un état à une particule est donc caractérisé par quatre nombres quantiques : l'indice de bande α associé à la symétrie de rotation du cristal et les trois composantes du vecteur d'onde \mathbf{k} associées à l'invariance par translation. Les états propres de Bloch ne sont pas des états propres de l'impulsion $\hat{\mathbf{p}}$ parce que la relation $p_i = \hbar k_i$ n'est pas vérifiée en général, à l'exception du cas limite, dans lequel le milieu nucléaire est uniforme. En ce sens, la quantité $\hbar k_i$ est une pseudo-impulsion. Le spectre d'énergie à une particule est ainsi formé d'un ensemble de nappes $\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\}$ dans l'espace des vecteurs d'ondes \mathbf{k} .

9.1.2 Du microscopique aux observables macroscopiques

Les fonctions d'ondes à une particule sont normalisées par

$$\int d^3r |\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}|^2 = 1 \quad (9.4)$$

de telle sorte que

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3r_1 \dots \int d^3r_N |\Psi\{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\}|^2 = 1. \quad (9.5)$$

La densité locale de neutrons est donnée par la valeur moyenne de l'opérateur (5.60)

$$n_n\{\mathbf{r}\} = \langle \Psi | \sum_{\alpha=1}^N \delta\{\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha\} \Psi \rangle, \quad (9.6)$$

qui se simplifie (dans la limite thermodynamique avec la correspondance (7.101)), en notant g la dégénérescence éventuelle d'un état $\{\alpha, \mathbf{k}\}$ et en utilisant les relations d'orthogonalité

$$\int d^3r \varphi_{\alpha\mathbf{k}}^*\{\mathbf{r}\} \varphi_{\beta\mathbf{k}'}\{\mathbf{r}\} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (9.7)$$

sous la forme d'une intégrale dans la première zone de Brillouin (ZB)

$$n_n\{\mathbf{r}\} = g\mathcal{V} \sum_{\alpha} \int_{\text{ZB}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f_{\alpha}\{\mathbf{k}\} |\varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}|^2, \quad (9.8)$$

où $f_\alpha\{\mathbf{k}\}$ désigne le facteur d'occupation, compris entre 0 et 1, de l'état $\{\alpha, \mathbf{k}\}$. En remarquant par ailleurs, avec la relation canonique

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{x}^i, \hat{p}_j] = \delta_j^i, \quad (9.9)$$

et l'Hamiltonien de la forme

$$\hat{H} \equiv -\nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2m^\oplus} \nabla + V, \quad (9.10)$$

que le commutateur (5.64) définissant l'opérateur vitesse \hat{v}^i est donné par

$$\hat{v}^i \equiv \frac{1}{i\hbar}[\hat{x}^i, \hat{H}] = \frac{1}{2} \left(\hat{p}_i \frac{1}{m^\oplus} + \frac{1}{m^\oplus} \hat{p}_i \right), \quad (9.11)$$

la densité locale de courant dans le référentiel de l'écorce se simplifie sous la forme

$$n^i\{\mathbf{r}\} = \langle \Psi | \sum_{\alpha=1}^N \delta\{\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha\} \hat{v}^i \Psi \rangle = g\mathcal{V} \sum_{\alpha} \int_{\text{ZB}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f_\alpha\{\mathbf{k}\} \varphi_{\alpha\mathbf{k}}^*\{\mathbf{r}\} \hat{v}^i \varphi_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}. \quad (9.12)$$

La densité totale de neutrons et la densité totale de courant définies respectivement par

$$n_n = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r n_n\{\mathbf{r}\}, \quad n^i = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r n^i\{\mathbf{r}\} \quad (9.13)$$

s'expriment sous la forme d'intégrales sur les états à une particule occupés

$$n_n = \sum_{\alpha} \int dn_{\alpha}, \quad n^i = \sum_{\alpha} \int v_{\alpha}^i dn_{\alpha} \quad (9.14)$$

en notant dn_{α} la mesure de la densité du nombre d'états occupés

$$dn_{\alpha} = g f_{\alpha}\{\mathbf{k}\} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}, \quad (9.15)$$

et v_{α}^i la valeur moyenne

$$v_{\alpha}^i \equiv \int d^3r \varphi_{\alpha}^*\{\mathbf{r}\} \hat{v}^i \varphi_{\alpha}\{\mathbf{r}\}. \quad (9.16)$$

Nous allons maintenant démontrer que la valeur moyenne de \hat{v}^i dans l'état $\varphi_{\alpha\mathbf{k}}$ est simplement donnée par la vitesse de groupe d'un paquet d'ondes de Bloch dont l'énergie est voisine de $\mathcal{E}_{\alpha}\{\mathbf{k}\}$

$$v_{\alpha}^i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}_{\alpha}}{\partial k_i}. \quad (9.17)$$

Développons tout d'abord la fonction $u_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}$ en séries de Fourier puisque celle-ci est périodique

$$u_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{K}} \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}, \quad \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \int d^3r u_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}. \quad (9.18)$$

La normalisation (9.7) de la fonction d'onde $\varphi_{\alpha\mathbf{k}}$ impose la relation

$$\sum_{\mathbf{K}} |\tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\}|^2 = 1. \quad (9.19)$$

L'énergie $\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\}$ est la valeur propre de l'opérateur \hat{H} avec pour vecteur propre $\varphi_{\alpha\mathbf{k}}$, ce qui se traduit dans la base de Fourier par la relation

$$\sum_{\mathbf{K}'} H_{\mathbf{k},\mathbf{K}'} \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{K}'\} = \mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\} \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\}, \quad (9.20)$$

ou de façon équivalente

$$\sum_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}^*\{\mathbf{K}\} H_{\mathbf{k},\mathbf{K}'} \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{K}'\} = \mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\}. \quad (9.21)$$

avec

$$H_{\mathbf{k},\mathbf{K}'} \equiv \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} \hat{H} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{K}')\cdot\mathbf{r}}. \quad (9.22)$$

En dérivant la relation (9.21) par rapport à k_i et en utilisant l'identité déduite de (9.19)

$$\sum_{\mathbf{K}} \left(\tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}^*\{\mathbf{K}\} \frac{\partial}{\partial k_i} \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\} + \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\} \frac{\partial}{\partial k_i} \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}^*\{\mathbf{K}\} \right) = 0, \quad (9.23)$$

nous obtenons une relation, qui est une illustration du théorème de Hellmann-Feynman

$$\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}_\alpha}{\partial k_i} = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}^*\{\mathbf{K}\} \frac{\partial H_{\mathbf{k},\mathbf{K}'}}{\partial k_i} \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{K}'\}. \quad (9.24)$$

Nous verrons dans le chapitre 10 que ce théorème est particulièrement important pour les simulations numériques, en fournissant une méthode de calcul *analytique* des dérivées. En appliquant le théorème de Green, les éléments de matrices de \hat{H} sont donnés par

$$H_{\mathbf{k},\mathbf{K}'} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r \left(\frac{\hbar^2(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{K}')}{2m^\oplus\{\mathbf{r}\}} + V\{\mathbf{r}\} \right) e^{i(\mathbf{K}'-\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}}. \quad (9.25)$$

Nous avons éliminé le terme de bord en utilisant les conditions aux limites périodiques de Born-Von Kàrmàn. Le théorème de Hellmann-Feynman peut ainsi se réécrire

$$\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}_\alpha}{\partial k_i} = \sum_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}^*\{\mathbf{K}\} (2k_i + K_i + K'_i) \tilde{\varphi}_{\alpha\mathbf{k}}\{\mathbf{K}'\} \int \frac{d^3r}{\mathcal{V}} \frac{\hbar}{2m^\oplus\{\mathbf{r}\}} e^{i(\mathbf{K}'-\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}}. \quad (9.26)$$

Il est maintenant assez facile de vérifier l'identité (9.17) en calculant explicitement la valeur moyenne de l'opérateur vitesse (9.11) avec la décomposition (9.18).

9.1.3 Définition des neutrons de conduction

La définition des états de conduction est plus ou moins arbitraire. Physiquement, les états de conduction sont les états à une particule qui contribuent de façon significative au courant. Nous pouvons tout d'abord remarquer que les états liés des noyaux sont peu sensibles aux déphasages de Bloch parce que les fonctions d'ondes correspondantes diminuent exponentiellement à l'extérieur des noyaux. Par conséquent l'énergie de ces états est principalement indépendante de \mathbf{k} donc la vitesse associée est à peu près nulle. Nous pouvons ainsi distinguer grossièrement deux sous-ensembles d'états à une particule : les états confinés et les états de conduction. La séparation entre ces deux ensembles n'est pas nette. D'ailleurs, en physique des solides ordinaires les états intermédiaires sont appelés des états de valence. La situation est un peu plus simple dans le contexte d'une étoile à neutrons, parce que dans les couches peu profondes de l'écorce interne, le potentiel moyen tend rapidement vers une valeur uniforme que nous pouvons choisir comme origine des énergies. Nous disposons ainsi d'un critère pour déterminer les états de conduction en ne retenant que les états dont l'énergie est positive $\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} > 0$. Néanmoins cette définition peut être ambiguë dans les couches plus profondes où les noyaux sont très proches les uns des autres. Dans ce cas, il est plus approprié de spécifier les états de conduction par les états dont l'énergie est supérieure à la valeur maximale du potentiel. Cette définition est d'ailleurs équivalente à la précédente lorsque les noyaux sont clairement séparés. C'est cette définition que nous adopterons dans la suite.

La densité de neutrons de conduction est donc dépendante de la définition employée pour spécifier les états de conduction. En revanche, la densité de courant n^i est physiquement bien déterminée puisque de toute façon la contribution des états confinés est négligeable du fait que $v^i \simeq 0$.

9.2 Etats d'équilibre

9.2.1 Configurations statiques

A température nulle et en l'absence de courant, la configuration d'équilibre est celle qui minimise la densité d'énergie U , pour une densité de neutrons n_n donnée. La densité d'énergie s'exprime en termes des énergies à une particule par une expression du type

$$U = U\{0\} + \int \mathcal{E}dn, \quad (9.27)$$

dans laquelle la contribution $U\{0\}$ est généralement ignorée pour la procédure de minimisation comme nous l'avons déjà discuté dans le chapitre 8 sur la méthode Hartree-Fock. Cette approximation est connue sous le nom de principe d'Aufbau en physique atomique¹. Dans cette section, la sommation sur les indices de bandes sera implicite de façon à alléger les notations.

¹Ce principe a été formulé par Niels Bohr dans les années 1920. Le terme Aufbau est emprunté à l'Allemand et signifie construction.

L'état fondamental Ψ est donc celui pour lequel les états à une particule occupés sont les états de plus basse énergie jusqu'à une certaine énergie de Fermi μ

$$\mathcal{E} \leq \mu. \quad (9.28)$$

Le facteur d'occupation est donc donné par une distribution de Heaviside ¹

$$f\{\mathbf{k}\} = \vartheta\{\mu - \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}\}. \quad (9.29)$$

L'énergie de Fermi μ est déterminée par le nombre total de particules dans le volume considéré. En restaurant explicitement les indices de bandes, l'énergie μ est donnée par l'équation intégrale

$$n_n = g \int_{\text{ZB}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vartheta\{\mu - \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}\}. \quad (9.30)$$

Cet état statique est ainsi caractérisé par une surface de Fermi S_F dans l'espace des vecteurs d'ondes \mathbf{k} , définie par l'équation

$$\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \mu. \quad (9.31)$$

Le point important est que cette surface est en général constituée de plusieurs morceaux *disjoints* comme l'illustre la figure 7.7.

Cette surface de Fermi possède toutes les symétries associées aux énergies à une particule. En particulier, lorsque le cristal possède un centre d'inversion ou simplement lorsque l'Hamiltonien est réel (notamment en l'absence de couplage spin-orbit), la surface est symétrique par rapport à l'origine comme conséquence de $\mathcal{E}\{-\mathbf{k}\} = \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}$. Il est facile de voir que dans ce cas l'état fondamental est complètement symétrique (représentation triviale du groupe de symétrie) en ce sens que la (pseudo) impulsion totale est nulle $\int d^3k k_i = 0$. Ce dernier résultat est une sorte de généralisation du théorème de Unsöld (voir par exemple Cowan (1981)), selon lequel la fonction d'onde électronique totale d'un atome dont les couches sont toutes exactement remplies, est à symétrie sphérique. En présence, d'un terme de couplage spin-orbit, l'état fondamental pourrait correspondre à une configuration polarisée : ce serait un exemple de brisure spontanée de symétrie.

9.2.2 Configurations non statiques

minimisation contrainte

Les configurations qui nous intéressent particulièrement ne sont pas les configurations statiques mais celles pour lesquelles le courant relatif de neutrons par rapport à l'écorce solide, est non nul. Pour obtenir ce type de configurations, nous devons minimiser la densité d'énergie U , non seulement pour une densité n_n donnée mais également avec la contrainte d'un courant n^i . La configuration qui minimise $U - \mu n_n - p_i n^i$, dans laquelle μ

¹ $\vartheta\{x\} = 1$ si $x > 0$, 0 sinon.

et p_i sont introduits comme multiplicateurs de Lagrange, est celle pour laquelle les états à une particule qui sont occupés sont ceux dont l'énergie vérifie l'inégalité

$$\mathcal{E} \leq \mu + p_i v^i. \quad (9.32)$$

Ce nouvel état d'équilibre est caractérisé par une surface de Fermi S modifiée définie par l'équation

$$\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \mu + p_i v^i. \quad (9.33)$$

Ceci implique que la densité d'énergie d'une configuration voisine, différera d'une quantité δU donnée au premier ordre dans la densité et le courant par la formule

$$\delta U = \mu \delta n + p_i \delta n^i. \quad (9.34)$$

Ceci montre que les multiplicateurs de Lagrange μ et p_i s'interprètent respectivement comme un potentiel chimique et une impulsion effective par particule.

La présence d'un courant non nul détermine une direction privilégiée et nous pouvons donc nous attendre à ce que le nouvel état fondamental ne soit pas complètement symétrique, autrement dit que la surface de Fermi n'est plus centrée à l'origine en $k_i = 0$.

déplacement uniforme de la surface de Fermi

L'utilisation de la même équation de Schrödinger à la fois pour le cas statique et le cas non statique, n'est justifiée que dans la limite où le courant est suffisamment faible pour être traité par la théorie des perturbations linéaires (comme c'est probablement le cas dans le contexte des sauts de fréquence observés dans les pulsars). Cela signifie que le multiplicateur de Lagrange lui-même, qui est défini comme la dérivée partielle de la densité d'énergie U par rapport au courant n^i , est nul dans la configuration statique $p_i = 0$ et est égal à $p_i = \delta p_i$ dans le cas non statique. Pour une valeur donnée du potentiel chimique μ , la différence entre les énergies de Fermi est donnée au premier ordre par $\delta \mathcal{E} = \delta(p_i v^i) = v^i \delta p_i$ soit en termes de l'impulsion perturbée

$$\delta \mathcal{E} = p_i v^i. \quad (9.35)$$

Nous pouvons interpréter cette différence comme résultant d'un déplacement δk_i de la surface de Fermi statique S_F tel que

$$\delta \mathcal{E} = \hbar v^i \delta k_i. \quad (9.36)$$

En comparant les deux égalités (9.35) et (9.36), nous voyons immédiatement que le choix le plus simple est un déplacement *uniforme* comme l'illustre la figure 9.1

$$\hbar \delta k_i = p_i. \quad (9.37)$$

D'autres choix pour le déplacement δk_i sont possibles, notamment en ajoutant n'importe quel vecteur tangent à la surface de Fermi, c'est-à-dire orthogonal à v^i .

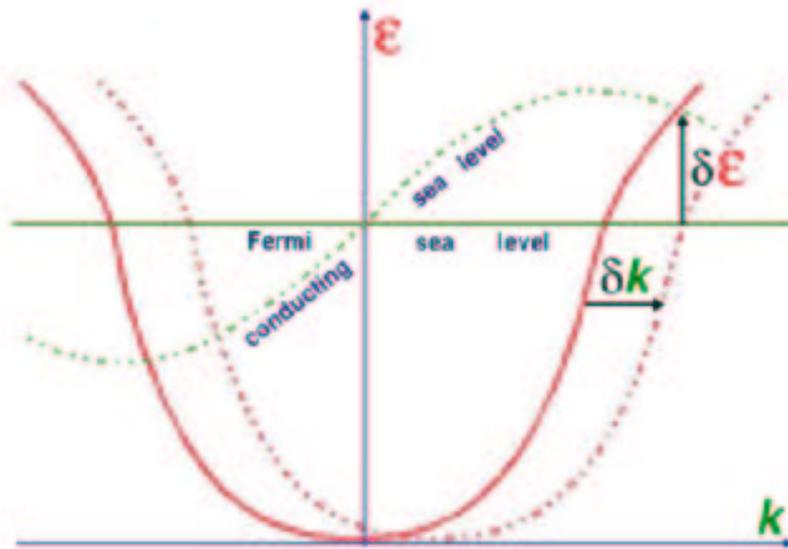


FIGURE 9.1 – Schéma illustrant le déplacement uniforme de la surface de Fermi en présence d'un courant non nul

9.3 Détermination des coefficients d'entraînement

9.3.1 Relation entre courant et impulsion

Dans la limite infinitésimale, le multiplicateur de Lagrange p_i peut donc s'interpréter physiquement comme un déplacement uniforme dans l'espace des vecteurs \mathbf{k} , de l'ensemble des états à une particule occupés et en particulier de la surface de Fermi. L'effet de ce déplacement est de balayer un volume infinitésimal donné par

$$\hbar d^3k = p_i dS_F^i, \quad (9.38)$$

le vecteur normal de la surface de Fermi étant spécifié, en terme de la mesure correspondante dS_F^i par la formule

$$dS_F^i = \frac{v^i}{v} dS_F, \quad (9.39)$$

ou plus explicitement si localement la surface est déterminée par une des coordonnées, disons k_1 , en fonction des deux autres, k_2 et k_3 , cette dernière expression devient

$$dS_F^i = \frac{v^i}{|v^\perp|} dk_2 dk_3. \quad (9.40)$$

Cela signifie que la différence entre les cas statique et non statique de l'intégrale dans le volume de Fermi d'une fonction \mathcal{F} est donnée au premier ordre par une intégrale sur la surface de Fermi statique S_F

$$\hbar \delta \int \mathcal{F} d^3k = p_i \oint \mathcal{F} dS_F^i. \quad (9.41)$$

Dans les cas où l'énergie à une particule est symétrique à l'origine, quelle que soit la forme de la surface de Fermi l'élément de surface dS_F^i sera évidemment antisymétrique. Ceci a pour corollaire que pour une fonction $\mathcal{F}\{\mathbf{k}\}$ paire, son intégrale dans le volume de Fermi ne sera pas affectée par le déplacement

$$\mathcal{F}\{\mathbf{k}\} = \mathcal{F}\{-\mathbf{k}\} \Rightarrow \delta \int \mathcal{F} d^3k = 0. \quad (9.42)$$

Pour une fonction impaire, c'est-à-dire $\mathcal{F}\{\mathbf{k}\} = -\mathcal{F}\{-\mathbf{k}\}$, c'est l'intégrale dans le volume de Fermi qui s'annule $\int \mathcal{F} d^3k = 0$ et par conséquent l'intégrale dans le volume de Fermi déplacé est simplement donnée par $\hbar \int \mathcal{F} d^3k = p_i \oint \mathcal{F} dS_F^i$.

Le cas d'une fonction paire, est illustré par la densité d'énergie U et la densité de neutrons n_n qui ne sont pas affectées par la présence du courant puisque en substituant respectivement $g\mathcal{E}/(2\pi)^3$ et $g/(2\pi)^3$ pour \mathcal{F} dans les formules précédentes, nous avons

$$\delta U = 0, \quad \delta n = 0. \quad (9.43)$$

Ce dernier résultat, qui s'exprime de façon équivalente par le fait que le volume de Fermi perturbé est égal au volume de Fermi statique, est une application du théorème de Landau-Luttinger.

Un exemple de fonction impaire est fourni par la densité de courant n^i . Puisque $n^i = 0$ dans la configuration statique caractérisée par $p_i = 0$, la densité de courant dans la configuration perturbée caractérisée par $p_i = \delta p_i$, est simplement $n^i = \delta n^i$. En remplaçant \mathcal{F} par $gv^i/(2\pi)^3$ dans les formules précédentes nous obtenons finalement une relation linéaire de la forme

$$n^i = \mathcal{K}^{ij} p_j, \quad (9.44)$$

dans laquelle le tenseur \mathcal{K}^{ij} est défini par une intégrale sur la surface de Fermi

$$\mathcal{K}^{ij} \equiv \frac{g}{(2\pi)^3 \hbar} \oint v^i dS_F^j. \quad (9.45)$$

Ce tenseur de mobilité peut s'exprimer sous une forme manifestement symétrique dans l'échange des indices i et j

$$\mathcal{K}^{ij} = \frac{g}{(2\pi)^3 \hbar} \oint \frac{v^i v^j}{v} dS_F = \mathcal{K}^{ji}. \quad (9.46)$$

Avant de continuer, nous pouvons d'ores et déjà faire remarquer que le tenseur de mobilité \mathcal{K}^{ij} est proportionnel au tenseur de conductivité électrique σ^{ij} , habituellement introduit en physique des solides par la loi d'Ohm qui relie la densité de courant électrique j^i et le champ électrique E_j par $j^i = \sigma^{ij} E_j$. Plus spécifiquement, lorsque les particules portent une charge électrique, disons e , comme les électrons dans un solide ordinaire, induisant une densité de courant électrique $j^i = en^i$, ce tenseur de conductivité électrique s'exprime simplement par

$$\sigma^{ij} = e^2 \tau \mathcal{K}^{ij}, \quad (9.47)$$

où τ est un temps caractéristique de relaxation.

Dans un milieu complètement désordonné (comme un liquide ou un solide amorphe par exemple) le calcul de \mathcal{K}^{ij} est théoriquement difficile, néanmoins le tenseur dans ce cas est isotrope, et se réduit simplement à un seul scalaire \mathcal{K}

$$\mathcal{K}^{ij} = \mathcal{K}\gamma^{ij}, \quad \mathcal{K} \equiv \frac{1}{3}\gamma_{ij}\mathcal{K}^{ij}. \quad (9.48)$$

Cette simplification subsiste dans un cristal, à condition que le réseau périodique soit de type cubique, comme c'est probablement le cas dans l'écorce d'une étoile à neutrons. En terme de ce scalaire \mathcal{K} , qui s'exprime par l'intégrale

$$\mathcal{K} = \frac{g}{3(2\pi)^3\hbar} \oint v dS_F, \quad (9.49)$$

la relation entre le courant et l'impulsion se réduit simplement à la forme

$$n^i = \mathcal{K}\gamma^{ij}p_j. \quad (9.50)$$

9.3.2 Du concept de masse effective mésoscopique

La relation entre courant et impulsion s'exprime sous une forme plus familière en introduisant une densité n_f de neutrons de conduction et une vitesse moyenne \bar{v}^i telles que

$$n^i = n_f\bar{v}^i. \quad (9.51)$$

L'impulsion p_i se réduit alors dans la limite isotrope, à une expression du type

$$p_i = m_\star\bar{v}_i, \quad (9.52)$$

où le covecteur vitesse est simplement donné par $\bar{v}_i = \gamma_{ij}\bar{v}^j$. La quantité m_\star s'interprète comme une masse effective moyenne par particule, que nous pourrions qualifier de « mésoscopique » parce qu'elle est définie à une échelle de distance grande devant la constante de réseau mais petite devant la distance entre deux plus proches tourbillons superfluides. Cette masse effective mésoscopique m_\star , définie par

$$m_\star \equiv \frac{n_f}{\mathcal{K}}, \quad (9.53)$$

ne doit pas être confondue avec la masse effective « microscopique » $m^\oplus\{\mathbf{r}\}$ introduite dans le chapitre 8. Cette masse effective mésoscopique coïncide donc avec la définition (5.86) de la masse effective m_\star^f introduite au chapitre 5 (en négligeant les tourbillons superfluides). La conductivité électrique σ , dont nous avons déjà montré la relation avec le tenseur de mobilité, se réduit alors à une formule de Drusdes (voir par exemple Ashcroft & Mermin (2003))

$$\sigma = \frac{n_f e^2 \tau}{m_\star}, \quad (9.54)$$

en supposant que n_f est la densité de porteurs de charge électrique e .

Contrairement au scalaire \mathcal{K} et au courant n^i , les définitions de la masse effective m_* et de la vitesse moyenne \bar{v}^i dépendent du choix adopté pour spécifier quels sont les états de conduction. En notant S_C la surface séparant dans l'espace \mathbf{k} les états confinés des états de conduction, par le théorème de Green dans le volume à l'intérieur de la surface de Fermi S_F mais à l'extérieur de S_C , la densité de neutrons de conduction s'exprime comme la différence d'intégrales de surfaces

$$n_f = \int dn = \frac{g}{3(2\pi)^3} \left(\oint k_i dS_F^i - \oint k_i dS_C^i \right). \quad (9.55)$$

De même, le scalaire de mobilité est donné par

$$\mathcal{K} = \frac{1}{3\hbar^2} \gamma_{ij} \int \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial k_i \partial k_j} dn + \frac{g}{3(2\pi)^3 \hbar} \oint v dS_C. \quad (9.56)$$

Cette dernière expression montre que le scalaire de mobilité est physiquement bien défini à condition que tous les états dont la vitesse v est significativement différente de zéro soient comptés comme des états de conduction, auquel cas le second terme est simplement négligeable devant le premier et peut ainsi être ignoré. En revanche, la restriction précédente n'est pas suffisante pour lever l'ambiguïté dans la définition de la densité n_f et par suite de la vitesse \bar{v}^i et de la masse effective m_* . Une façon de lever cette ambiguïté serait par exemple de travailler dans la limite où la surface S_C est contractée en un point à l'origine, c'est-à-dire d'adopter la convention que *tous* les états doivent être comptés comme des états de conduction si bien que $n_f = n_n$. Néanmoins avec cette définition, nous pouvons nous attendre à ce que la vitesse effective moyenne \bar{v}^i soit très petite tandis que la masse effective m_* soit très grande devant la masse m .

9.4 Application à la matière nucléaire homogène

Nous allons illustrer le concept de masse effective mésoscopique dans le cas limite de la matière nucléaire homogène (non polarisée), pour laquelle les équations Skyrme Hartree-Fock que nous avons présentées au chapitre précédent, sont exactement solubles. Les densités de spin \mathbf{J}_q ($q=n,p$) sont nulles et puisque les densités de particules sont constantes par hypothèse, le terme de couplage spin-orbit \mathbf{W}_q est également nul. Les densités cinétiques τ_q sont également constantes.

Le potentiel à une particule $U_q\{\mathbf{r}\}$ et la masse effective microscopique $m_q^\oplus\{\mathbf{r}\}$ sont donc uniformes et sont donnés par

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^\oplus} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{8}n_b(t_1(2+x_1) + t_2(2+x_2)) - \frac{1}{8}n_q(t_1(1+2x_1) - t_2(1+2x_2)), \quad (9.57)$$

$$\begin{aligned}
U_q &= \frac{1}{2}t_0((2+x_0)n_b - (1+2x_0)n_q) \\
&+ \frac{1}{24}t_3[(2+x_3)(2+\gamma)n_b^{\gamma+1} - (2x_3+1)(2n_b^\gamma n_q + \gamma n_b^{\gamma-1}(n_n^2 + n_p^2))] \\
&+ \frac{1}{8}(t_1(2+x_1) + t_2(2+x_2))\tau_b + \frac{1}{8}(t_2(2x_2+1) - t_1(2x_1+1))\tau_q.
\end{aligned} \tag{9.58}$$

Un état à une particule (de neutron ou de proton) est une onde plane de vecteur d'onde \mathbf{k} (d'impulsion $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$) et d'énergie

$$\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_q^\oplus} + U_q. \tag{9.59}$$

Comme le couplage spin-orbit est nul, chaque état \mathbf{k} est doublement dégénéré pour les deux polarisations de spin. Puisque les niveaux sont saturés en spin, chaque état \mathbf{k} est donc doublement occupé. Les densités cinétiques sont alors données par

$$\tau_q = \frac{3}{5}n_q^{5/3}(3\pi^2)^{2/3}. \tag{9.60}$$

La surface de Fermi pour les neutrons est une sphère de rayon $k_F = (3\pi^2 n_n)^{1/3}$. Le coefficient de mobilité est très simple à calculer dans ce cas puisque la vitesse de groupe est constante sur la sphère

$$\mathcal{K} = \frac{1}{3} \frac{2}{(2\pi)^3 \hbar} \oint_{\text{F}} v \, dS = \frac{1}{3} \frac{2}{(2\pi)^3 \hbar} 4\pi k_F^2 v_F, \tag{9.61}$$

avec

$$v_F = \left. \frac{1}{\hbar} \frac{d\mathcal{E}}{dk} \right|_{k=k_F}. \tag{9.62}$$

Il est naturel dans cet exemple de compter tous les états occupés comme des états de conduction, par conséquent nous avons $n_f = n_n$. La masse effective mésoscopique m_\star , est alors donnée par le rapport entre l'impulsion et la vitesse d'une particule au niveau de Fermi

$$\frac{m_\star}{m} = \frac{\hbar k_F}{m v_F} \Leftrightarrow p_F = \hbar k_F = m_\star v_F. \tag{9.63}$$

Dans ce cas, nous avons la relation $m_\star = m_n^\oplus$.

Dans le cas plus générale d'interactions nucléon-nucléon effective $\hat{v}^{(2)}$ de portée finie, comme par exemple les forces de type Gogny (1975), la masse effective m_n^\oplus est simplement égale à la masse ordinaire. En revanche, le potentiel à une particule U n'est pas local. La relation entre énergie et vecteur d'onde n'est plus simplement quadratique et est de la forme

$$\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Sigma\{k\}, \tag{9.64}$$

dans laquelle $\Sigma\{k\}$ est l'énergie propre, qui provient de l'interaction de la particule avec le milieu. La surface de Fermi est toujours une sphère de même rayon. Cependant, la masse effective mésoscopique est maintenant donnée par la formule

$$\frac{m}{m_\star} = 1 + \left. \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{k_F} \frac{d\Sigma}{dk} \right|_{k=k_F}. \tag{9.65}$$

Contrairement aux forces de contact, les états à une particule dans le cas général, n'ont pas tous la même masse effective.

Dans les deux cas, la masse effective mésoscopique que nous avons introduite par la formule (9.53), coïncide avec la définition usuelle de la masse effective au niveau de Fermi

$$\frac{m}{m_\star} = \left. \frac{m}{p_F} \frac{d\mathcal{E}}{dp} \right|_{p=p_F}. \quad (9.66)$$

Dans ce cas particulier, la distinction entre masses effectives mésoscopique et microscopique disparaît parce que le milieu est invariant d'échelle par hypothèse.

Dans la matière nucléaire infinie, la masse effective est typiquement inférieure à la masse nue, quelque soit la fraction de protons. La masse effective dans la matière nucléaire symétrique (masse effective isoscalaire) à la densité de saturation est liée au module de compressibilité (voir Chabanat *et al.* (1997)). Elle est contrainte par les mesures des résonances géantes quadrupolaires isoscalaires dans les noyaux, qui imposent $0.8 \lesssim m_\star/m \lesssim 0.9$.

Nous avons représenté la masse effective m_\star/m sur la figure 9.2, dans le cas limite de la matière pure de neutrons pour différentes paramétrisations de Skyrme (voir l'annexe C). Dans tous les cas, nous avons $m_\star < m$. En revanche, les masses effectives varient de manière significative d'une force à l'autre. En particulier, les forces SkM* (Bartel *et al.* (1982)) engendrent une masse effective $m_\star \simeq m$ pour un large intervalle de densités. La paramétrisation SLy4 de Chabanat (1995) figure parmi les plus récentes. Elle est supposée particulièrement bien adaptée à la description des noyaux loins de la ligne de stabilité et de la matière pure de neutrons. La paramétrisation SII de Vautherin & Brink (1972) est montrée à titre indicatif. Comme le montre la figure 9.3, la masse effective de neutron reste inférieure à la masse ordinaire dans la matière nucléaire asymétrique.

Nous avons également calculé les différentes composantes du champ moyen dans l'approximation Skyrme Hartree-Fock avec la paramétrisation SLy4. Comme le montre la figure 9.4, les contributions directes et d'échanges se compensent presque complètement de telle sorte que le champ moyen résulte essentiellement du champ de réarrangement. Ceci reflète l'importance des termes dépendant de la densité dans l'interaction nucléon-nucléon effective, et par conséquent ceci met en évidence le rôle joué par les effets de milieu. Ceci montre aussi que les corrélations introduites par le principe de Pauli sont importantes puisque le champ d'échange est du même ordre de grandeur en valeur absolue que le champ direct. Les autres paramétrisations aboutissent à la même conclusion.

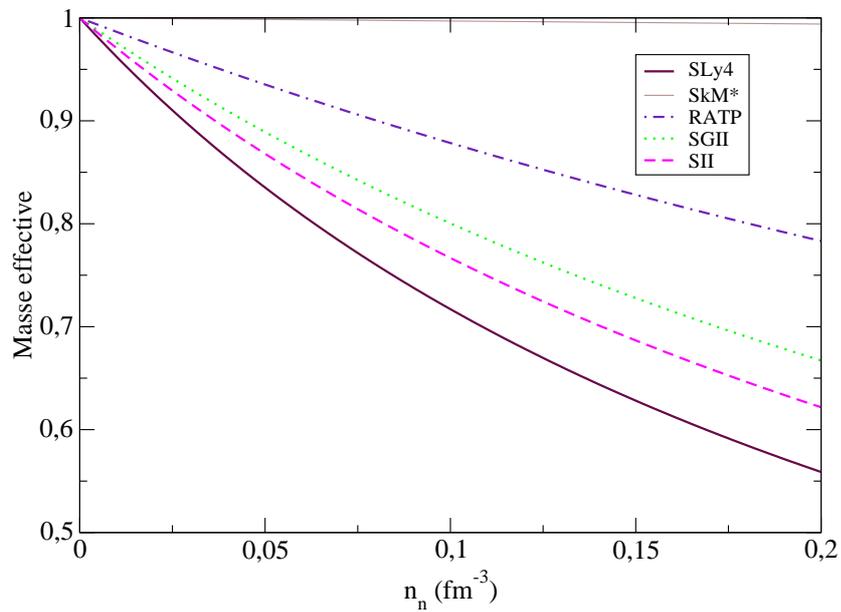


FIGURE 9.2 – Masse effective m_*/m pour la matière pure de neutrons dans l'approximation Skyrme Hartree-Fock avec différentes paramétrisations.

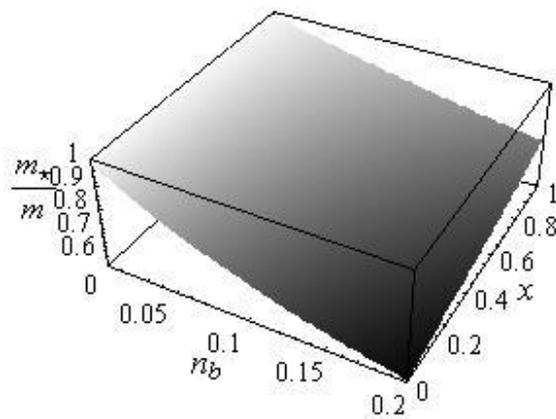


FIGURE 9.3 – Masse effective de neutron m_*/m dans la matière nucléaire dans l'approximation Skyrme Hartree-Fock (paramétrisation SLy4), en fonction de la densité baryonique n_b (fm^{-3}) et de la fraction protonique $x \equiv n_p/n_b$.

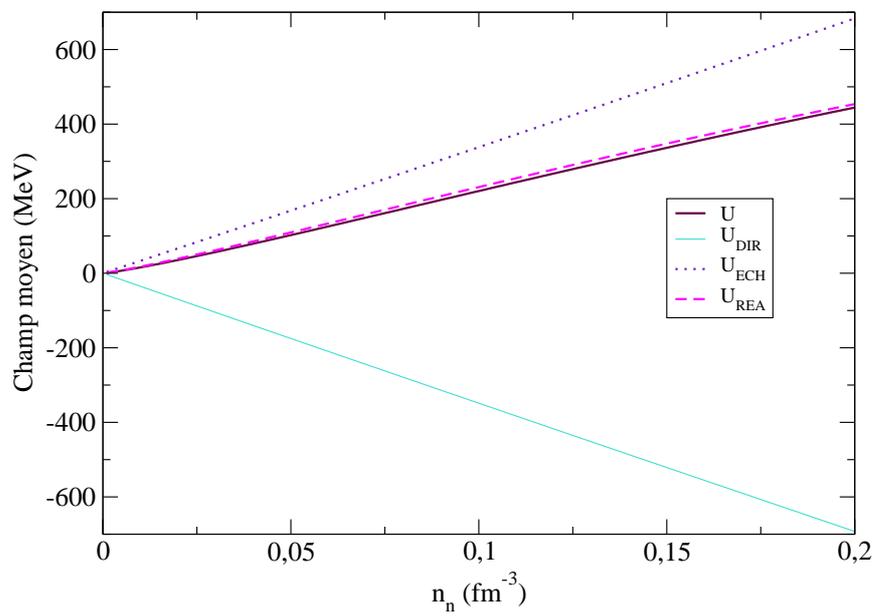


FIGURE 9.4 – Contributions directes U_{DIR} , d'échange U_{ECH} et de réarrangement U_{REA} au champ moyen U dans l'approximation Skyrme Hartree-Fock, pour la matière pure de neutrons (paramétrisation SLy4).

Chapitre 10

Méthodes numériques

Sommaire

10.1 Calcul du spectre d'énergie	233
10.2 Application au calcul de la structure de bandes	236
10.3 Méthodes d'intégrations	251

Les équations Hartree-Fock, qui sont analytiquement solubles dans la limite d'un milieu homogène, nécessitent un traitement numérique dans le cas plus général de la matière nucléaire dans l'écorce d'une étoile à neutrons. Nous allons décrire quelques techniques, élaborées essentiellement en physique du solide, tant pour résoudre l'équation de Schrödinger au delà de l'approximation de Wigner-Seitz que pour calculer les intégrales dans la première zone de Brillouin ou sur la surface de Fermi.

10.1 Calcul du spectre d'énergie

Nous allons présenter dans cette section quelques méthodes pour résoudre l'équation de Schrödinger à une particule. Nous ne discuterons que des méthodes variationnelles, dites de Rayleigh-Ritz qui consistent à rechercher des solutions comme des combinaisons linéaires d'un ensemble donné de fonctions d'essai (des ondes planes par exemple). D'ailleurs cette méthode n'a pas seulement un intérêt pratique mais aussi théorique. Elle permet ainsi entre autre de déduire les équations Hartree-Fock (sur un déterminant de Slater) sans avoir recours aux méthodes diagrammatiques de la théorie à N corps. Cette démarche donne lieu à des approximations de plus en plus fines qui correspondent à étendre successivement l'espace des fonctions d'essai. Il existe d'autres types de méthodes, comme la discrétisation de l'équation de Schrödinger sur une grille spatiale que nous ne discuterons pas. Nous verrons plus particulièrement comment appliquer les méthodes variationnelles dans la théorie des bandes pour le calcul du spectre d'énergie des neutrons de conduction dans l'écorce.

10.1.1 Méthode de Rayleigh-Ritz

Nous souhaitons résoudre l'équation de Schrödinger suivante où \hat{H} est l'Hamiltonien à une particule :

$$\hat{H}|\varphi\rangle = \mathcal{E}|\varphi\rangle \quad (10.1)$$

avec certaines conditions aux limites (les conditions de Bloch pour le cas des neutrons de conduction dans l'écorce).

La méthode variationnelle (ou spectrale) repose sur le théorème de Ritz selon lequel la valeur moyenne de l'Hamiltonien est stationnaire au voisinage de ses valeurs propres. La démonstration est la suivante. Considérons des variations de la valeur moyenne de \hat{H} , définie par

$$\langle H \rangle \equiv \frac{\langle \varphi | \hat{H} \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}, \quad (10.2)$$

suite à des variations de la fonction d'onde φ . La condition de stationnarité, $\delta\langle H \rangle = 0$ s'exprime comme

$$\delta\langle \varphi | \hat{H} \varphi \rangle - \langle H \rangle \delta\langle \varphi | \varphi \rangle = 0, \quad (10.3)$$

qui se simplifie sous la forme (en utilisant le fait que \hat{H} est un opérateur autoadjoint, à savoir $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$)

$$\langle (\hat{H} - \langle H \rangle) \varphi | \delta\varphi \rangle + \langle \delta\varphi | (\hat{H} - \langle H \rangle) \varphi \rangle. \quad (10.4)$$

Cette condition est satisfaite pour des variations $\delta\varphi$ arbitraires si la fonction d'onde φ est un état propre de \hat{H}

$$\hat{H}|\varphi\rangle = \langle H \rangle|\varphi\rangle. \quad (10.5)$$

La méthode variationnelle consiste à développer la fonction d'onde φ sur un ensemble donné (fini) de fonctions d'essai $\{\phi_\alpha\}$ ($\alpha = 1, \dots, N$) choisies de façon à satisfaire les conditions aux limites puis à rechercher quelles sont les combinaisons linéaires de ces fonctions

$$|\varphi\rangle = \sum_{\alpha=1}^N c_\alpha |\phi_\alpha\rangle \quad (10.6)$$

qui rendent la valeur moyenne de l'Hamiltonien \hat{H} stationnaire. Résoudre l'équation de Schrödinger est alors équivalent à un problème plus simple de diagonalisation de matrice finie :

$$\sum_{\beta=1}^N H_{\alpha\beta} c_\beta = \mathcal{E} \sum_{\beta=1}^N S_{\alpha\beta} c_\beta \quad (10.7)$$

avec

$$H_{\alpha\beta} = \langle \phi_\alpha | \hat{H} \phi_\beta \rangle \quad (10.8)$$

l'élément de matrice (hermitienne) de l'Hamiltonien et

$$S_{\alpha\beta} = \langle \phi_\alpha | \phi_\beta \rangle \quad (10.9)$$

l'élément de matrice de recouvrement, qui se réduit à une matrice diagonale $S_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$ lorsque les fonctions d'essai sont orthonormées. En notant X le vecteur colonne des coefficients $\{c_\alpha\}$, nous pouvons réécrire le problème aux valeurs propres sous forme matricielle (en notant par le symbole \cdot la multiplication matricielle)

$$H \cdot X = \mathcal{E} S \cdot X \quad (10.10)$$

Les valeurs propres \mathcal{E} correspondantes fournissent seulement une approximation des énergies propres du système parce que nous avons réduit le problème aux valeurs propres dans l'espace de Hilbert au sous-espace balayé par les fonctions d'essai $\{\phi_\alpha\}$. Cette méthode est exacte dans le cas particulier où l'ensemble des fonctions $\{\phi_\alpha\}$ forme une base de l'espace de Hilbert. De plus la valeur propre \mathcal{E} la plus basse fournit une borne supérieure à l'énergie exacte la plus basse de l'Hamiltonien \hat{H} . En effet, en développant la fonction d'onde φ sur l'ensemble des états propres orthonormés (exacts) de \hat{H} , disons $\{\varphi_\alpha\}$ avec pour énergies propres $\{\mathcal{E}_\alpha\}$,

$$\varphi = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \varphi_{\alpha}, \quad (10.11)$$

nous avons (\mathcal{E}_0 étant l'énergie de l'état fondamental)

$$\langle \varphi | \hat{H} \varphi \rangle = \sum_{\alpha} |a_{\alpha}|^2 \mathcal{E}_{\alpha} \geq \mathcal{E}_0 \sum_{\alpha} |a_{\alpha}|^2, \quad (10.12)$$

avec

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = \sum_{\alpha} |a_{\alpha}|^2, \quad (10.13)$$

d'où

$$\langle H \rangle \geq \mathcal{E}_0. \quad (10.14)$$

Le choix des fonctions $\{\phi_\alpha\}$ n'est pas complètement arbitraire puisque la fonction d'onde φ doit satisfaire certaines conditions aux limites. Notamment lorsque le système possède la symétrie d'un cristal, la fonction d'onde doit obéir au théorème de Floquet-Bloch et par suite les fonctions $\{\phi_\alpha\}$ doivent être des fonctions de Bloch comme nous l'avons vu au chapitre 7.

Il peut arriver que la matrice de recouvrement soit dégénérée, c'est-à-dire de déterminant nul. Cela signifie que les fonctions $\{\phi_\alpha\}$ ne sont pas toutes linéairement indépendantes. Dans ce cas, il faut diagonaliser l'Hamiltonien dans le sous-ensemble des fonctions $\{\phi_\alpha\}$ linéairement indépendantes. Le choix de fonctions mutuellement orthogonales garantit que toutes les fonctions sont linéairement indépendantes. Néanmoins, cela ne signifie pas pour autant que cet ensemble de fonctions forme une base de l'espace de Hilbert.¹

¹Les ondes planes sont une base de l'espace de Hilbert d'après le théorème de Fourier.

10.1.2 Théorème de Hellmann-Feynman

Supposons que l'Hamiltonien $H\{\lambda\}$ dépende de façon continue d'un paramètre λ . Pour une valeur donnée de ce paramètre, l'Hamiltonien admet un ensemble d'énergies propres $\mathcal{E}_\alpha\{\lambda\}$, où α désigne l'ensemble des nombres quantiques nécessaires à la description d'un état propre. En variant continûment λ , nous obtenons ainsi des nappes d'énergie. Le théorème de Hellmann-Feynman (voir Feynman (1939)) se traduit, pour un état propre α donné, par la formule :

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \lambda} = X^\dagger \cdot \left(\frac{\partial H}{\partial \lambda} - \mathcal{E} \frac{\partial S}{\partial \lambda} \right) \cdot X \quad (10.15)$$

avec pour normalisation des états $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$ soit $X^\dagger \cdot S \cdot X = 1$. De façon plus explicite,

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \lambda} = \sum_{\alpha, \beta} c_\alpha^* c_\beta \left(\frac{\partial H_{\alpha\beta}}{\partial \lambda} - \mathcal{E} \frac{\partial S_{\alpha\beta}}{\partial \lambda} \right). \quad (10.16)$$

Dans le cas particulier où la matrice de recouvrement S est diagonale, le théorème de Hellmann-Feynman se réduit simplement à

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \lambda} = X^\dagger \cdot \left(\frac{\partial H}{\partial \lambda} \right) \cdot X \quad (10.17)$$

10.2 Application au calcul de la structure de bandes

Nous allons maintenant décrire différentes méthodes pour le calcul des bandes d'énergie, développées dans le contexte des électrons de conduction dans un solide ordinaire et directement transposables au cas des neutrons de conduction dans l'écorce d'une étoile à neutrons. Nous recherchons plus spécifiquement à résoudre une équation de Schrödinger de la forme

$$-\nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{\mathbf{r}\}} \nabla \varphi\{\mathbf{r}\} + V\{\mathbf{r}\} \varphi\{\mathbf{r}\} = \mathcal{E} \varphi\{\mathbf{r}\}, \quad (10.18)$$

avec les conditions aux limites de Bloch

$$\varphi\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \varphi\{\mathbf{r}\}, \quad \mathbf{T} = \ell^a \mathbf{e}_a \quad (10.19)$$

où $m^\oplus\{\mathbf{r}\}$ et $V\{\mathbf{r}\}$ ont la périodicité du réseau. Le potentiel $V\{\mathbf{r}\}$ et la masse $m^\oplus\{\mathbf{r}\}$ sont déduits d'une interaction nucléon-nucléon effective dans l'approximation Skyrme-Hartree-Fock (voir chapitre 8) ou simplement introduits de façon plus phénoménologiques.

10.2.1 Ondes planes

La méthode variationnelle la plus simple, proposée par Morse (1930), consiste à développer la fonction d'onde en ondes planes, définies par :

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{q} \rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cell}} \mathcal{V}_{\text{cell}}}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (10.20)$$

N_{cell} étant le nombre de noeuds du réseau et $\mathcal{V}_{\text{cell}}$ le volume d'une cellule primitive. Par le théorème de projection, nous pouvons construire un ensemble de fonctions d'essai qui satisfont aux conditions aux limites de Bloch. Comme les représentations irréductibles du groupe des translations sont unidimensionnelles, l'opérateur de projection $\hat{P}\{\mathbf{k}\}$ associé à une représentation de vecteur d'onde \mathbf{k} est simplement donné par

$$\hat{P}\{\mathbf{k}\} \equiv \frac{1}{N_{\text{cell}}} \sum_{\mathbf{T}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}} \hat{T}. \quad (10.21)$$

En faisant agir cet opérateur sur des ondes planes du type (10.20), seules ne subsistent les ondes planes dont le vecteur d'onde satisfait la condition de diffraction de Bragg $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{K}$, où \mathbf{K} est un vecteur du réseau réciproque. Par conséquent, nous pouvons rechercher des solutions de l'équation de Schrödinger sous la forme

$$|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\mathbf{K}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\} |\mathbf{k} + \mathbf{K}\rangle \quad (10.22)$$

$$\sum_{\mathbf{K}} |\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\}|^2 = 1, \quad (10.23)$$

Mathématiquement, le développement en ondes planes est un simple développement en série de Fourier de fonctions périodiques en trois dimensions :

$$\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cell}}\mathcal{V}_{\text{cell}}}} \sum_{\mathbf{K}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}. \quad (10.24)$$

En remarquant que pour une fonction ayant la périodicité du réseau $\mathcal{F}\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = \mathcal{F}\{\mathbf{r}\}$, nous avons

$$\int d^3r \mathcal{F}\{\mathbf{r}\} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{T}} \int_{\text{cell}} d^3r \mathcal{F}\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{T})} = N_{\text{cell}} \int_{\text{cell}} d^3r \mathcal{F}\{\mathbf{r}\} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}, \quad (10.25)$$

nous pouvons écrire la matrice de l'Hamiltonien :

$$H_{\alpha\beta}^{\text{PW}}\{\mathbf{k}\} \equiv \langle \mathbf{k} + \mathbf{K}_{\alpha} | \hat{H} | \mathbf{k} + \mathbf{K}_{\beta} \rangle = (\mathbf{k} + \mathbf{K}_{\alpha}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{K}_{\beta}) \frac{\hbar^2}{2\tilde{m}_{\oplus}\{\mathbf{K}_{\beta} - \mathbf{K}_{\alpha}\}} + \tilde{V}\{\mathbf{K}_{\beta} - \mathbf{K}_{\alpha}\} \quad (10.26)$$

avec

$$\tilde{V}\{\mathbf{K}\} = \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} d^3r V\{\mathbf{r}\} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \quad (10.27)$$

$$\frac{\hbar^2}{2\tilde{m}_{\oplus}\{\mathbf{K}\}} = \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} d^3r \frac{\hbar^2}{2m_{\oplus}\{\mathbf{r}\}} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \quad (10.28)$$

où l'intégration porte sur une cellule primitive du cristal (cellule de Wigner-Seitz par exemple mais pas nécessairement).

En se rappelant que les ondes planes sont orthogonales

$$\frac{1}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} d^3r e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_\alpha)\cdot\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_\beta)\cdot\mathbf{r}} = \delta_{\alpha\beta}, \quad (10.29)$$

il s'ensuit que la matrice de recouvrement est diagonale :

$$S_{\alpha\beta}^{\text{PW}} \equiv \langle \mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha | \mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}. \quad (10.30)$$

Nous aurons besoin pour évaluer le tenseur de mobilité et par suite la masse effective m_\star , de calculer la vitesse de groupe v^i définie par

$$v^i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_i}. \quad (10.31)$$

Nous pouvons calculer cette vitesse en appliquant directement le théorème de Hellmann-Feynman avec $\lambda = \hbar k_i$

$$v^i = \sum_{\mathbf{K}_\alpha, \mathbf{K}_\beta} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}^*\{\mathbf{K}_\alpha\} \frac{\hbar(2k^i + K_\alpha^i + K_\beta^i)}{2\tilde{m}^\oplus\{\mathbf{K}_\beta - \mathbf{K}_\alpha\}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}\{\mathbf{K}_\beta\}. \quad (10.32)$$

Cette expression devient particulièrement simple lorsque la masse effective microscopique est une constante $m^\oplus\{\mathbf{r}\} = m^\oplus$:

$$v^i = \sum_{\mathbf{K}} |\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\}|^2 \frac{\hbar(k^i + K^i)}{2m^\oplus}. \quad (10.33)$$

Dans les applications numériques, il est donc possible (et préférable !) de calculer « analytiquement » le gradient de l'énergie sans avoir recours à la méthode des différences finies.

La méthode des ondes planes est pour l'instant exacte, nous avons simplement développé la fonction d'onde en série de Fourier. L'approximation est de ne considérer qu'un nombre fini de termes dans ce développement. Plus précisément, les sommations sur les vecteurs du réseau réciproque sont tronquées de façon à ne contenir que les termes tels que

$$\frac{\hbar^2(\mathbf{k} + \mathbf{K})^2}{2m_n} < \mathcal{E}_{\text{coupure}}. \quad (10.34)$$

Numériquement, cette méthode est très simple à implémenter. Elle est surtout adaptée lorsque l'échelle de variations de la masse $m^\oplus\{\mathbf{r}\}$ et du potentiel $V\{\mathbf{r}\}$ n'est pas trop petite devant la distance entre deux noyaux. Nous pouvons estimer grossièrement le nombre d'ondes planes (et par suite l'énergie de coupure $\mathcal{E}_{\text{coupure}}$) nécessaires pour décrire les états propres du système par le raisonnement suivant. Pour décrire correctement le comportement de la fonction d'onde à l'intérieur des noyaux de taille R , le développement en ondes plane doit contenir les vecteurs d'onde de norme inférieure ou égale à $q = 2\pi/R$ (correspondant à une énergie de coupure $\mathcal{E}_{\text{coupure}} = \hbar^2 q^2 / 2m_n$). Le nombre N correspondant d'ondes planes est égal au nombre de noeuds du réseau réciproque contenus dans

une sphère de rayon $q = 2\pi/R$, or à chaque noeuds est alloué un volume V_{zB} donc N est déterminé par

$$\frac{4}{3}\pi q^3 = NV_{\text{zB}}. \quad (10.35)$$

En écrivant $V_{\text{zB}} = (2\pi)^3/a^3$, nous obtenons

$$N \propto \left(\frac{a}{R}\right)^3. \quad (10.36)$$

La méthode des ondes planes peut donc être envisagée pour le calcul du spectre des neutrons dans la partie profonde de l'écorce lorsque la taille des noyaux est du même ordre de grandeur que la distance entre les noyaux. A plus basse densité en revanche, $R \ll a$, le nombre d'ondes planes est prohibitif. D'autres méthodes doivent alors être considérées.

Cette estimation du nombre d'ondes plane soulève un problème technique fondamental dans la théorie des bandes : la description de deux types d'états quantiques très différents. D'une part les états de « coeur » associés à des particules essentiellement localisées dans une petite région de l'espace (les ions dans un solide, les noyaux dans une étoile à neutrons) et d'autre part, les états de « conduction » correspondant à des particules complètement délocalisées dans tout l'espace. Les états de coeur (états liés) peuvent s'obtenir assez facilement en étudiant un atome ou un noyau isolé. En effet, comme la fonction d'onde est quasiment nulle en dehors des noyaux, ces états ne sont pas très sensibles aux conditions aux limites. Par conséquent les bandes d'énergie du cristal associées à des états de coeur s'obtiennent comme $\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} \simeq \mathcal{E}^c$ où \mathcal{E}^c désigne les énergies de l'atome ou du noyau isolé, obtenues en appliquant des conditions aux limites qui simplifient le problème, comme par exemple dans l'approximation de Wigner-Seitz. Les états de conduction sont plus difficiles à calculer. En effet, comme les états propres de l'Hamiltonien associés à des valeurs propres distinctes sont orthogonaux, cela implique que la fonction d'onde de ces états de conduction varie fortement à l'intérieur des atomes (ou des noyaux dans l'écorce). Alors que quelques ondes planes suffisent à la description de la fonction d'onde à l'extérieur des atomes (et permettent de satisfaire les conditions aux limites de Bloch), un grand nombre d'ondes planes est nécessaire pour reproduire les oscillations au voisinage des atomes. C'est donc le fait d'imposer des conditions aux limites de Bloch qui donne lieu à ce problème. Plus précisément, le problème est de concilier la symétrie essentiellement sphérique des atomes avec l'invariance par translation du cristal. Le traitement séparé des états liés d'un noyau et des états de conduction dans un milieu homogène est beaucoup plus simple. C'est une difficulté majeure du calcul des bandes et nous allons voir quelles méthodes ont été proposées pour la surmonter.

10.2.2 Ondes planes orthogonales

La difficulté de la méthode des ondes planes tient dans la description des états liés des noyaux, dont la fonction d'onde oscille fortement à l'intérieur des noyaux et décroît exponentiellement en dehors. Herring (1940) a ainsi été amené à proposer une nouvelle

méthode dite des ondes planes orthogonales (voir aussi Callaway (1955), Woodruff (1957)) dans laquelle les ondes planes sont orthogonalisées à ces états de coeur.

Supposons que nous connaissions les états φ_c de plus basse énergie associés aux états de coeur

$$\hat{H}|\varphi_c\rangle = \mathcal{E}^c|\varphi_c\rangle \quad (10.37)$$

et que nous choisissons pour les fonctions ϕ_n des ondes planes orthogonalisées à ces états de coeur par la procédure de Schmidt :

$$|\phi_{\mathbf{q}}\rangle = |\mathbf{q}\rangle - \sum_c \langle \varphi_c | \mathbf{q} \rangle |\varphi_c\rangle \quad (10.38)$$

L'équation de Schrödinger pour les ondes planes $|\mathbf{q}\rangle$ peut alors se réécrire comme

$$(\hat{H} + \hat{V}_R)|\mathbf{q}\rangle = \mathcal{E}|\mathbf{q}\rangle \quad (10.39)$$

avec \hat{V}_R donné par le théorème de Phillips & Kleinman (1959)

$$\hat{V}_R\varphi\{\mathbf{r}\} = \int d^3r' V_R\{\mathbf{r}, \mathbf{r}'\}\varphi\{\mathbf{r}'\} \quad (10.40)$$

$$V_R\{\mathbf{r}, \mathbf{r}'\} = \sum_c (\mathcal{E} - \mathcal{E}^c)\varphi_c^*\{\mathbf{r}'\}\varphi_c\{\mathbf{r}\}. \quad (10.41)$$

Autrement dit \hat{V}_R joue le rôle d'un potentiel non local, dépendant de l'énergie et répulsif pour tous les états φ d'énergie $\mathcal{E} > \mathcal{E}^c$ puisque

$$\langle \varphi | \hat{V}_R \varphi \rangle = \sum_c (\mathcal{E} - \mathcal{E}^c) |\langle \varphi^c | \varphi \rangle|^2 > 0. \quad (10.42)$$

De plus ce potentiel répulsif est essentiellement nul en dehors des noyaux puisque sa dépendance spatiale est déterminée par les fonctions d'onde des états de coeur. Ce potentiel s'ajoute au potentiel attractif des noyaux et le compense partiellement. Cet effet d'annulation conduit à une convergence plus rapide de cette méthode par rapport à un développement en ondes planes. Remarquons au passage que les états de plus basse énergie obtenus avec la méthode des ondes planes orthogonales sont les états d'énergie $\mathcal{E} > \mathcal{E}^c$.

En pratique, les fonctions d'onde $\varphi_{\mathbf{k}}^c$ des états de coeur associées au vecteur d'onde \mathbf{k} sont construites à partir des fonction d'onde « atomiques » $\Phi^c\{\mathbf{r}\}$ correspondantes, de façon à satisfaire le théorème de Bloch¹ :

$$\varphi_{\mathbf{k}}^c\{\mathbf{r}\} = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cell}}}} \sum_{\mathbf{T}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}} \Phi^c\{\mathbf{r} - \mathbf{T}\}. \quad (10.43)$$

¹Ceci est une application directe du théorème de projection.

Les fonctions d'onde atomiques $\Phi\{\mathbf{r}\}$ sont les solutions de l'équation de Schrödinger pour un atome isolé. En supposant que les noyaux sont sphériques, nous pouvons écrire la fonction d'onde d'un noyau situé à l'origine des coordonnées

$$\Phi^c\{\mathbf{r}\} = Y_{lm}\{\hat{r}\}u_{nl}\{r\} \quad (10.44)$$

où $Y_{lm}\{\hat{r}\}$ désigne une harmonique sphérique (\hat{r} sont les coordonnées angulaires de \mathbf{r} et r la coordonnée radiale), n étant le nombre quantique principal, l est le nombre quantique orbital et m le nombre quantique azimutal.

L'application du principe variationnel aboutit au problème aux valeurs propres suivant :

$$H^{\text{OPW}} \cdot X = \mathcal{E}S^{\text{OPW}} \cdot X \quad (10.45)$$

avec les matrices $H_{\alpha\beta}^{\text{OPW}}\{\mathbf{k}\} \equiv \langle \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\alpha} | \hat{H} | \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\beta} \rangle$ et $S_{\alpha\beta}^{\text{OPW}}\{\mathbf{k}\} \equiv \langle \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\alpha} | \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\beta} \rangle$. Les éléments de matrice de l'Hamiltonien sont plus compliqués que ceux obtenus avec seulement des ondes planes puisqu'ils nécessitent le calcul d'intégrales de recouvrement

$$\langle \varphi^c | \mathbf{q} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}_{\text{cell}}}} \int_{\text{cell}} \Phi^c\{\mathbf{r}\}^* e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \quad (10.46)$$

Pour calculer cette intégrale, développons l'onde plane en harmoniques sphériques

$$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l\{qr\} Y_{lm}\{\hat{q}\}^* Y_{lm}\{\hat{r}\}. \quad (10.47)$$

La fonction de Bessel sphérique d'ordre l , $j_l\{x\}$, est la solution régulière à l'origine de l'équation différentielle

$$\frac{d^2 j_l\{x\}}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dj_l\{x\}}{dx} + j_l = \frac{l(l+1)}{x^2} j_l, \quad (10.48)$$

normalisée telle que au voisinage de l'origine

$$j_l\{x\} \sim \frac{x^l}{1.3.5\dots(2l+1)}. \quad (10.49)$$

En utilisant la propriété d'orthogonalité des harmoniques sphériques

$$\int d\Omega Y_{lm}\{\hat{r}\}^* Y_{l'm'}\{\hat{r}\} = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (10.50)$$

l'intégrale se simplifie sous la forme (puisque les états de coeur sont localisés à l'intérieur d'une cellule primitive, nous pouvons étendre l'intégration jusqu'à $r \rightarrow +\infty$)

$$\langle \varphi^c | \mathbf{q} \rangle = \frac{4\pi}{\sqrt{\mathcal{V}_{\text{cell}}}} i^l Y_{lm}\{\hat{q}\}^* \int_0^{+\infty} dr r^2 j_l\{qr\} u_{nl}\{r\}. \quad (10.51)$$

En supposant que les états de coeurs sont orthogonaux, les éléments de matrice de l'Hamiltonien se réduisent à

$$H_{\alpha\beta}^{\text{OPW}}\{\mathbf{k}\} = H_{\alpha\beta}^{\text{PW}}\{\mathbf{k}\} - \sum_c \mathcal{E}^c \langle \varphi^c | \mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha \rangle^* \langle \varphi^c | \mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta \rangle. \quad (10.52)$$

Avec le théorème d'addition, et en introduisant les notations $\mathbf{q}_\alpha = \mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha$ et $\mathbf{q}_\beta = \mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta$

$$P_l\{\cos\theta_{\alpha\beta}\} = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}\{\hat{q}_\alpha\}^* Y_{lm}\{\hat{q}_\beta\} \quad (10.53)$$

où $P_l\{x\}$ est le polynôme de Legendre¹ d'ordre l et θ est l'angle entre les directions de \mathbf{q}_α et \mathbf{q}_β défini par

$$\cos\theta_{\alpha\beta} = \frac{\mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{q}_\beta}{q_\alpha q_\beta}, \quad (10.54)$$

la matrice de l'Hamiltonien s'exprime finalement en fonction de l'intégrale

$$I_{nl}\{q\} \equiv \sqrt{\frac{4\pi(2l+1)}{\mathcal{V}_{\text{cell}}}} \int_0^{+\infty} dr r^2 u_{nl}\{r\} j_l\{qr\}, \quad (10.55)$$

$$H_{\alpha\beta}^{\text{OPW}}\{\mathbf{k}\} = H_{\alpha\beta}^{\text{PW}}\{\mathbf{k}\} - \sum_{n,l} \mathcal{E}_{nl}^c I_{nl}\{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha|\} I_{nl}\{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta|\} P_l\{\cos\theta_{\alpha\beta}\}. \quad (10.56)$$

De plus, les ondes planes « orthogonales » (aux états de coeur!) ne sont plus orthogonales, ce qui signifie que la matrice de recouvrement n'est plus diagonale :

$$S_{\alpha\beta}^{\text{OPW}}\{\mathbf{k}\} = \delta_{\alpha\beta} - \sum_{n,l} I_{nl}\{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha|\} I_{nl}\{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta|\} P_l\{\cos\theta_{\alpha\beta}\}. \quad (10.57)$$

Les éléments de matrices nécessaires pour le calcul de la vitesse s'écrivent :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H_{\alpha\beta}^{\text{OPW}}}{\partial k_i} - \frac{\mathcal{E}}{\hbar} \frac{\partial S_{\alpha\beta}^{\text{OPW}}}{\partial k_i} &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H_{\alpha\beta}^{\text{PW}}}{\partial k_i} - \sum_{n,l} \frac{1}{\hbar} (\mathcal{E} - \mathcal{E}_{nl}) \left(P_l\{\cos\theta_{\alpha\beta}\} \frac{k_i}{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha|} J_{nl}\{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha|\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{k_i}{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta|} J_{nl}\{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta|\} + \frac{\partial P_l}{\partial k_i} I_{nl}\{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha|\} I_{nl}\{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta|\} \right) \end{aligned} \quad (10.58)$$

$$J_{nl}\{q\} \equiv \sqrt{\frac{4\pi(2l+1)}{\mathcal{V}_{\text{cell}}}} \int_0^{+\infty} dr r^2 u_{nl}\{r\} \frac{dj_l}{dx} \Big|_{x=qr}. \quad (10.59)$$

Ainsi en choisissant des fonctions mieux adaptées au problème, nous avons non seulement compliqué les matrices mais aussi le problème puisque la matrice S n'est plus diagonale. Ceci indique d'ailleurs que ces ondes planes modifiées ne forment plus une base

¹le polynôme de Legendre est défini par $P_l\{x\} = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$

de l'espace de Hilbert ce qui peut engendrer des singularités associées à des dépendances linéaires. Ces singularités se manifestent par la présence de valeurs propres nulles dans la matrice S .

D'un autre côté, la taille de ces matrices est en règle générale plus petite pour une même précision que celles obtenues avec des ondes planes. Nous pouvons quand même espérer que le temps total de calcul des bandes soit réduit. Ces quelques remarques illustrent parfaitement les difficultés inhérentes au choix d'une méthode de calcul. Nous verrons que dans certains cas, le temps de calcul nécessaire pour évaluer les éléments de matrices peut être du même ordre de grandeur que le temps de diagonalisation !

10.2.3 Pseudopotentiel

La méthode des pseudopotentiels proposée par Austin *et al.* (1962) repose sur la même idée que les ondes planes orthogonales avec une approche différente. Nous avons vu que l'orthogonalisation des états par rapport aux états de coeur est équivalente à l'introduction d'un potentiel répulsif qui annule plus ou moins le potentiel attractif des noyaux (voir Cohen & Heine (1961)). La méthode des pseudopotentiels consiste donc à résoudre à l'aide des ondes planes une équation de Schrödinger effective pour les états de conduction, dans laquelle le potentiel des noyaux est remplacé par un pseudopotentiel plus « lisse ». Le pseudopotentiel est paramétré par une fonction donnée dont les coefficients sont ajustés de façon à reproduire un certain nombre de propriétés du solide.

Depuis la fin des années 70, de nouvelles méthodes *ab initio* ont été développées pour construire des pseudopotentiels plus réalistes. Tout d'abord, les états électroniques pour un atome isolé sont calculés de façon autocohérente par la théorie de la fonctionnelle de densité dans l'approximation de la densité locale (équations de Kohn & Sham (1965)). Les fonctions d'ondes atomiques sont ensuite utilisées pour construire un pseudopotentiel atomique. Le pseudopotentiel du solide s'obtient alors par symétrisation.

La méthode des pseudopotentiels s'applique naturellement à la description de l'écorce externe et des couches les moins denses de l'écorce interne d'une étoile à neutrons. En revanche, cette méthode semble plus difficile à adapter dans les régions plus profondes de la croûte. En effet, le calcul du pseudopotentiel nécessite la définition de noyaux « isolés ». Or une telle définition paraît impossible, parce que le nombre de neutrons libres par noyau excède très largement le nombre d'états liés d'un noyau. Autrement dit les noyaux de l'écorce s'ils étaient séparés les uns des autres, seraient si loin de la vallée de stabilité β qu'ils seraient instables et se désintégreraient presque immédiatement par émission de neutrons.

10.2.4 Ondes planes augmentées

La méthode des ondes planes augmentées a été proposée par Slater (1937) (voir aussi Slater (1953), Saffren & Slater (1953); pour un exposé détaillé de cette méthode et sa généralisation relativiste le lecteur pourra consulter le livre de Loucks (1967)). L'idée est de décomposer la cellule de Wigner-Seitz en deux régions, comme l'illustre la figure 10.1 :

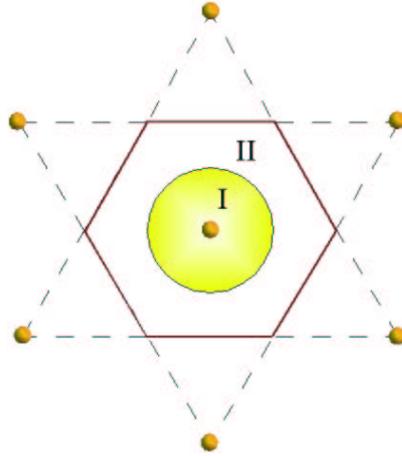


FIGURE 10.1 – Décomposition de la cellule de W-S dans la méthode des ondes planes augmentées, pour un réseau bidimensionnel hexagonal. L'hexagone représente la cellule de W-S.

la région I centrée autour de l'atome dans laquelle le potentiel $V\{\mathbf{r}\}$ et la masse effective microscopique $m^\oplus\{\mathbf{r}\}$ sont supposés à symétrie sphérique, et la région II intersticielle dans laquelle le potentiel et la masse effective sont supposés constants. Contrairement à la physique du solide, cette hypothèse sur la forme du potentiel et de la masse effective (couramment mentionnée par *muffin tin approximation* dans la littérature anglo-saxonne) n'est pas très restrictive en physique nucléaire du fait de la portée beaucoup plus réduite des interactions entre nucléons en comparaison avec la force électromagnétique entre électrons et atomes.

A l'intérieur de la sphère de rayon R_s (région I), l'équation de Schrödinger (10.18) se réduit à une équation radiale en développant la fonction d'onde sur la base des harmoniques sphériques :

$$\phi^{\text{int}}\{\mathbf{r}\} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_{lm} Y_{lm}\{\hat{r}\} u_l\{r\} \quad (10.60)$$

où u_l est la solution radiale de l'équation de Schrödinger

$$-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{r\}} \frac{d}{dr} u_l + \left(V\{r\} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m^\oplus\{r\} r^2} \right) u_l\{r\} = \mathcal{E} u_l\{r\}. \quad (10.61)$$

Dans la région II intersticielle, la fonction d'onde est décomposée en ondes planes de telle sorte que les conditions aux limites de Bloch (10.19) sont automatiquement satisfaites lorsque le vecteur d'onde est de la forme $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{K}$

$$\phi_{\mathbf{q}}^{\text{ext}}\{\mathbf{r}\} = \langle \mathbf{r} | \mathbf{q} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}_{\text{cell}}}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \quad (10.62)$$

Les coefficients A_{lm} sont déterminés en imposant la continuité de la fonction d'onde sur la surface de la sphère. L'onde plane augmentée à l'intérieur de la sphère est donc finalement

donnée par

$$\phi_{\mathbf{q}}^{\text{int}}\{\mathbf{r}\} = \frac{4\pi}{\sqrt{\mathcal{V}_{\text{cell}}}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l \frac{j_l\{qR_s\}}{u_l\{\mathcal{E}, R_s\}} Y_{lm}\{\hat{q}\}^* Y_{lm}\{\hat{r}\} u_l\{\mathcal{E}, r\}. \quad (10.63)$$

La fonction d'onde à l'intérieur de la cellule de Wigner-Seitz est alors développée en ondes planes augmentées

$$|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\mathbf{K}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\} |\phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}\rangle. \quad (10.64)$$

En pratique, les sommations dans les équations (10.60) et (10.64) sont tronquées, respectivement à une valeur l_{max} et \mathcal{E}_{max} .

Une onde plane augmentée présente en général une discontinuité de son gradient en $r = R_s$. Néanmoins cette discontinuité est absorbée dans le développement (10.64) de telle sorte que la fonction d'onde et son gradient sont continus (voir Harmon *et al.* (1973)). Une propriété importante des ondes planes augmentées est leur dépendance dans l'énergie. Cela signifie en particulier que les matrices de recouvrement et de l'Hamiltonien dépendent aussi de l'énergie. Pour déterminer les énergies propres et les coefficients du développement, il faut donc résoudre directement l'équation caractéristique

$$\det\{M_{\alpha\beta}\{\mathbf{k}, \mathcal{E}\}\} = 0, \quad (10.65)$$

avec

$$M_{\alpha\beta}\{\mathbf{k}, \mathcal{E}\} \equiv \langle \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\alpha} | (\hat{H} - \mathcal{E}) \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\beta} \rangle. \quad (10.66)$$

Nous allons maintenant calculer les éléments de matrice

$$M_{\alpha\beta}\{\mathbf{k}, \mathcal{E}\} = \int_{\text{cell}} d^3r (\nabla \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\alpha}^*) \cdot \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{\mathbf{r}\}} \nabla \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\beta} + \int_{\text{cell}} d^3r (V - \mathcal{E}) \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\alpha}^* \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\beta}. \quad (10.67)$$

L'intégrale porte seulement sur une seule cellule de Wigner-Seitz puisque la contribution de chaque cellule primitive est égale. Dans la région intersticielle, la fonction d'onde est simplement une onde plane, la masse effective microscopique est constante $m^\oplus\{r\} = m^\oplus\{R_s\}$, de même que le potentiel dont la valeur $V\{R_s\} = 0$ est choisie comme origine des énergies d'où

$$\begin{aligned} \int_{\text{inters}} d^3r (\nabla \phi_{\mathbf{q}_\alpha}^{\text{ext}*}) \cdot \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{\mathbf{r}\}} \nabla \phi_{\mathbf{q}_\beta}^{\text{ext}} + \int_{\text{inters}} d^3r (V - \mathcal{E}) \phi_{\mathbf{q}_\alpha}^{\text{ext}*} \phi_{\mathbf{q}_\beta}^{\text{ext}} = \\ \left(\mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{q}_\beta \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{R_s\}} - \mathcal{E} \right) \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \int_{\text{inters}} d^3r e^{i(\mathbf{q}_\beta - \mathbf{q}_\alpha) \cdot \mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (10.68)$$

L'intégrale dans la région intersticielle s'exprime comme la différence entre l'intégrale dans toute la cellule et l'intégrale dans la sphère

$$\int_{\text{inters}} d^3r e^{i(\mathbf{q}_\beta - \mathbf{q}_\alpha) \cdot \mathbf{r}} = \int_{\text{cell}} d^3r e^{i(\mathbf{q}_\beta - \mathbf{q}_\alpha) \cdot \mathbf{r}} - \int_s d^3r e^{i(\mathbf{q}_\beta - \mathbf{q}_\alpha) \cdot \mathbf{r}}. \quad (10.69)$$

Puisque les ondes planes sont orthogonales, l'intégrale dans toute la cellule est égale à

$$\int_{\text{cell}} d^3r e^{i(\mathbf{q}_\beta - \mathbf{q}_\alpha) \cdot \mathbf{r}} = \mathcal{V}_{\text{cell}} \delta_{\alpha\beta}. \quad (10.70)$$

L'intégrale dans la sphère est donnée par

$$\int_s d^3r e^{i(\mathbf{q}_\beta - \mathbf{q}_\alpha) \cdot \mathbf{r}} = \int_0^{R_s} j_0\{|\mathbf{q}_\beta - \mathbf{q}_\alpha|r\} r^2 dr = \frac{4\pi R_s^2}{|\mathbf{q}_\beta - \mathbf{q}_\alpha|} j_1\{|\mathbf{q}_\beta - \mathbf{q}_\alpha|R_s\}, \quad (10.71)$$

en utilisant (10.47) et (10.50). En particulier, puisque $Y_{00}\{\hat{r}\} = 1/\sqrt{4\pi}$, nous avons la relation

$$\int d\Omega Y_{lm}\{\hat{r}\} = \sqrt{4\pi} \delta_{l0} \delta_{m0}. \quad (10.72)$$

La contribution de la région intersticielle à l'élément de matrice est donc finalement

$$M_{\alpha\beta}^{\text{inters}} = \left((\mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta) \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{R_s\}} - \mathcal{E} \right) \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{4\pi R_s^2}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \frac{j_1\{|\mathbf{K}_\alpha - \mathbf{K}_\beta|R_s\}}{|\mathbf{K}_\alpha - \mathbf{K}_\beta|} \right). \quad (10.73)$$

La contribution à l'élément de matrice issue de la région sphérique est d'après le théorème de Green

$$M_{\alpha\beta}^s = \int_s \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\alpha}^{\text{int}} * \left(\nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{\mathbf{r}\}} \nabla + V\{\mathbf{r}\} - \mathcal{E} \right) \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\beta}^{\text{int}} + \int_s \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\alpha}^{\text{int}} * \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{R_s\}} \nabla \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_\beta}^{\text{int}} \cdot d\mathbf{S}. \quad (10.74)$$

L'intégrale de volume est nulle puisque ϕ est une solution de l'équation de Schrödinger à l'intérieur de la sphère. L'intégrale de surface sur la sphère de rayon R_s est donnée par

$$M_{\alpha\beta}^s = \frac{4\pi R_s^2}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{R_s\}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l\{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha|R_s\} j_l\{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta|R_s\} P_l\{\cos\theta_{\alpha\beta}\} \frac{\partial}{\partial r} \log u_l\{\mathcal{E}, R_s\}, \quad (10.75)$$

avec

$$\frac{\partial}{\partial r} \log u_l\{\mathcal{E}, R_s\} \equiv \frac{1}{u_l\{\mathcal{E}, R_s\}} \frac{\partial u_l\{\mathcal{E}, r\}}{\partial r} \Big|_{r=R_s}. \quad (10.76)$$

Finalement en rassemblant tous les termes, nous avons

$$M\{\mathbf{k}, \mathcal{E}\}_{\alpha\beta} = \left((\mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta) \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{R_s\}} - \mathcal{E} \right) \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{4\pi R_s^2}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \frac{j_1\{|\mathbf{K}_\alpha - \mathbf{K}_\beta|R_s\}}{|\mathbf{K}_\alpha - \mathbf{K}_\beta|} \right) + \frac{4\pi R_s^2}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{R_s\}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l\{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha|R_s\} j_l\{|\mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta|R_s\} P_l\{\cos\theta_{\alpha\beta}\} \frac{\partial}{\partial r} \log u_l\{\mathcal{E}, R_s\}. \quad (10.77)$$

Comme dans le cas des ondes planes orthogonales, nous voyons qu'en modifiant les ondes planes de façon à les rendre plus adaptées au problème nous avons compliqué les éléments de matrices. A la différence des ondes planes orthogonales, les éléments de matrice ont

une dépendance *non linéaire* dans l'énergie par l'intermédiaire de la dérivée logarithmique de la fonction d'onde radiale. Cette méthode est donc numériquement très lourde puisque pour chaque vecteur d'onde de Bloch \mathbf{k} , les bandes d'énergie s'obtiennent en recherchant les racines du pôleynome caractéristique ce qui nécessite un grand nombre d'évaluations du déterminant. Les racines de multiplicité impaire, qui apparaissent dans le pôleynome caractéristique par un facteur du type $(\mathcal{E} - \mathcal{E}_0)^n$ où \mathcal{E}_0 est une valeur propre et n un entier impair, s'obtiennent par dichotomie puisque le déterminant change de signe lorsque l'énergie est supérieure ou inférieure à la valeur propre. En revanche, le calcul des racines de multiplicité paire est beaucoup plus délicat.

La dérivée logarithmique est une fonction décroissante de l'énergie d'après la règle de somme de type Friedel (voir par exemple Harrison (1980))

$$\int_0^{R_s} u_l\{\mathcal{E}, r\}^2 r^2 dr = -\frac{\hbar^2}{2m^{\oplus}\{R_s\}} u_l\{\mathcal{E}, R_s\}^2 R_s^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{E} \partial r} \log u_l\{\mathcal{E}, R_s\}, \quad (10.78)$$

et présente des singularités pour les énergies associées à des noeuds de la fonction d'onde radiale sur la surface de la sphère $u_l\{\mathcal{E}, R_s\} = 0$ auquel cas les éléments de matrice divergent : c'est le problème des asymptotes. La présence de ces résonances rend la méthode des ondes planes augmentées très instable ou du moins requiert une grande expertise pour les contourner en ajustant le rayon R_s (le rayon maximal est celui correspondant à un empilement compact de sphères centrées autour des atomes). Néanmoins cette méthode semble particulièrement bien adaptée au calcul des bandes dans l'écorce d'une étoile à neutrons, notamment à basse densité où la distance entre les noyaux est très grande devant leur rayon, puisqu' au voisinage d'un noyau la fonction d'onde d'un nucléon oscille fortement mais est essentiellement à symétrie sphérique. C'est d'ailleurs pour cette raison que l'approximation de Wigner-Seitz a été largement utilisée en physique nucléaire dans ce contexte.

10.2.5 Ondes planes augmentées linéarisées

Une des difficultés essentielles de la méthode de Slater tient dans la dépendance non linéaire en énergie des éléments de matrice. Marcus (1967) a été un des premiers à suggérer que ce problème pouvait être évité en ajoutant à la fonction d'onde radiale à l'intérieur de la sphère sa dérivée par rapport à l'énergie. Andersen (1975) a ainsi proposé une nouvelle méthode, la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (pour plus de détails techniques le lecteur pourra se référer au livre de Singh (1994) sur le sujet). A l'intérieur de la sphère de rayon R_s , la fonction d'onde est développée en harmoniques sphériques

$$\phi^{\text{int}}\{\mathbf{r}\} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (A_{lm} u_l\{\mathcal{E}_l, r\} + B_{lm} \dot{u}_l\{\mathcal{E}_l, r\}) Y_{lm}\{\hat{r}\}. \quad (10.79)$$

Dans ce développement, contrairement à la méthode originale des ondes planes augmentées, l'énergie n'est pas un paramètre variationnel mais est fixée à une valeur donnée \mathcal{E}_l , éventuellement différente pour chaque valeur du nombre quantique orbital l . De cette

façon la dépendance non linéaire des éléments de matrices dans l'énergie est éliminée. $u_l\{\mathcal{E}_l, r\}$ est la solution radiale pour l'énergie \mathcal{E}_l et sa dérivée par rapport à l'énergie, qui est notée

$$\dot{u}_l\{\mathcal{E}_l, r\} \equiv \left. \frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} u_l\{\mathcal{E}, r\} \right|_{\mathcal{E}=\mathcal{E}_l}, \quad (10.80)$$

satisfait l'équation différentielle

$$-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{r\}} \frac{d}{dr} \dot{u}_l + \left(V\{r\} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m^\oplus\{r\}r^2} - \mathcal{E}_l \right) \dot{u}_l = u_l. \quad (10.81)$$

A l'intérieur de la sphère, la fonction d'onde pour une énergie \mathcal{E} différente de \mathcal{E}_l n'est donc plus une solution exacte de l'équation de Schrödinger. Néanmoins l'erreur introduite par la linéarisation est seulement d'ordre quadratique $(\mathcal{E} - \mathcal{E}_l)^2$ dans la fonction d'onde puisque, pour une énergie \mathcal{E} voisine de \mathcal{E}_l la fonction d'onde obtenue par le principe variationnel convergera vers le développement de Taylor

$$u_l\{\mathcal{E}, r\} = u_l\{\mathcal{E}_l, r\} + (\mathcal{E} - \mathcal{E}_l) \dot{u}_l\{\mathcal{E}_l, r\} + o((\mathcal{E} - \mathcal{E}_l)^2). \quad (10.82)$$

Le progrès majeur de cette méthode par rapport à la version originale de Slater (1937) tient dans le fait que pour un vecteur de Bloch \mathbf{k} donné, nous pouvons calculer toutes les bandes d'énergies dans le voisinage d'une énergie fixée en une *seule* diagonalisation.

La fonction d'onde radiale est normalisée par

$$\int_0^{R_s} u_l\{\mathcal{E}_l, r\}^2 r^2 dr = 1. \quad (10.83)$$

Ceci implique, en dérivant cette équation par rapport à l'énergie, que les fonctions d'onde u_l et \dot{u}_l sont orthogonales

$$\int_0^{R_s} u_l\{\mathcal{E}_l, r\} \dot{u}_l\{\mathcal{E}_l, r\} r^2 dr = 0. \quad (10.84)$$

La normalisation de la fonction d'onde \dot{u}_l est alors fixée. En effet, en multipliant l'équation différentielle pour \dot{u}_l par u_l et celle pour u_l par \dot{u}_l donne après soustraction

$$-\frac{1}{r^2} u_l \frac{d}{dr} r^2 \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{r\}} \frac{d}{dr} \dot{u}_l + \frac{1}{r^2} \dot{u}_l \frac{d}{dr} r^2 \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{r\}} \frac{d}{dr} u_l = u_l \dot{u}_l. \quad (10.85)$$

En multipliant les deux membres par r^2 et en intégrant, conduit finalement, en remarquant que

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{r^2} u_l \frac{d}{dr} r^2 \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{r\}} \frac{d}{dr} \dot{u}_l + \frac{1}{r^2} \dot{u}_l \frac{d}{dr} r^2 \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{r\}} \frac{d}{dr} u_l \\ & = \frac{d}{dr} \left(-u_l r^2 \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{r\}} \frac{d}{dr} \dot{u}_l + \dot{u}_l r^2 \frac{\hbar^2}{2m^\oplus\{r\}} \frac{d}{dr} u_l \right), \end{aligned} \quad (10.86)$$

et en utilisant le théorème de Green, à la relation

$$\frac{\hbar^2 R_s^2}{2m^\oplus \{R_s\}} (\dot{u}_l \{ \mathcal{E}_l, R_s \} u_l' \{ \mathcal{E}_l, R_s \} - u_l \{ \mathcal{E}_l, R_s \} \dot{u}_l' \{ \mathcal{E}_l, R_s \}) = 1, \quad (10.87)$$

en notant par \prime la dérivée $\partial/\partial r$. Par contre la norme de la fonction \dot{u}_l , définie par

$$N_l \equiv \int_0^{R_s} r^2 \dot{u}_l \{ \mathcal{E}_l, r \}^2 dr, \quad (10.88)$$

n'est pas nécessairement égale à 1. Nous pouvons également remarquer en suivant le même raisonnement que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \left(-u_l \{ \mathcal{E}_l^1, r \} r^2 \frac{\hbar^2}{2m^\oplus \{r\}} \frac{d}{dr} u_l \{ \mathcal{E}_l^2, r \} + u_l \{ \mathcal{E}_l^1, r \} r^2 \frac{\hbar^2}{2m^\oplus \{r\}} \frac{d}{dr} u_l \{ \mathcal{E}_l^2, r \} \right) \\ = (\mathcal{E}_l^2 - \mathcal{E}_l^1) r^2 u_l \{ \mathcal{E}_l^1, r \} u_l \{ \mathcal{E}_l^2, r \}, \end{aligned} \quad (10.89)$$

et par intégration

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2 R_s^2}{2m^\oplus \{R_s\}} (-u_l \{ \mathcal{E}_l^1, R_s \} u_l' \{ \mathcal{E}_l^2, R_s \} + u_l \{ \mathcal{E}_l^2, R_s \} u_l' \{ \mathcal{E}_l^1, R_s \}) \\ = (\mathcal{E}_l^2 - \mathcal{E}_l^1) \int_0^{R_s} r^2 u_l \{ \mathcal{E}_l^1, r \} u_l \{ \mathcal{E}_l^2, r \} dr. \end{aligned} \quad (10.90)$$

Cette dernière relation montre que les fonctions d'onde, pour un même nombre quantique orbital l , associées à des énergies différentes sont automatiquement orthogonales dès que les fonctions d'onde et leurs dérivées s'annulent sur la sphère. Les fonctions d'ondes des états de conduction sont orthogonaux à tous les états localisés à l'intérieur de la sphère de rayon R_s , en particulier les états de coeur. Néanmoins il peut arriver que certains états très peu liés au noyau se superposent aux états de conduction auquel cas il apparaît des bandes fantômes dans le spectre d'énergie. Ces bandes sont facilement identifiables en variant les paramètres R_s et \mathcal{E}_l . Pour éviter qu'une telle situation ne survienne, il faut fixer le rayon de la sphère à sa valeur maximale. Lorsque le problème persiste il est alors nécessaire d'augmenter les fonctions par des orbitales locales.

Comme dans la méthode de Slater, la fonction d'onde est développée en ondes planes dans la région intersticielle. En ajoutant \dot{u}_l , nous pouvons désormais imposer, outre la continuité de la fonction d'onde, la continuité de sa dérivée sur la surface de la sphère, soit sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} u_l & \dot{u}_l \\ u_l' & \dot{u}_l' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{lm} \\ B_{lm} \end{pmatrix} = \frac{4\pi}{\sqrt{\mathcal{V}_{\text{cell}}}} i^l Y_{lm} \{ \hat{q} \}^* \begin{pmatrix} j_l \{ qR_s \} \\ qj_l' \{ qR_s \} \end{pmatrix}$$

Avec le choix de normalisation précédente, le déterminant de la matrice est simplement égal à $-2m^\oplus \{R_s\} / \hbar^2 R_s^2$ d'où ¹

$$A_{lm} = \frac{\hbar^2 R_s^2}{2m^\oplus \{R_s\}} \frac{4\pi}{\sqrt{\mathcal{V}_{\text{cell}}}} i^l Y_{lm} \{ \hat{q} \}^* \left(\dot{u}_l \{ \mathcal{E}_l, R_s \} j_l' \{ qR_s \} - \dot{u}_l' \{ \mathcal{E}_l, R_s \} j_l \{ qR_s \} \right) \quad (10.91)$$

¹L'inverse d'une matrice est égale à la matrice des cofacteurs transposés divisée par le déterminant.

$$B_{lm} = \frac{\hbar^2 R_s^2}{2m^\oplus \{R_s\}} \frac{4\pi}{\sqrt{\mathcal{V}_{\text{cell}}}} i^l Y_{lm} \{\hat{q}\}^* \left(u_l' \{\mathcal{E}_l, R_s\} j_l \{qR_s\} - u_l \{\mathcal{E}_l, R_s\} j_l' \{qR_s\} \right), \quad (10.92)$$

en adoptant la notation

$$j_l' \{qR_s\} \equiv \left. \frac{d}{dr} j_l \{qr\} \right|_{r=R_s} = q \left. \frac{d}{dx} j_l \{x\} \right|_{x=qR_s}. \quad (10.93)$$

Les coefficients A_{lm} et B_{lm} restant toujours finis, nous avons ainsi complètement éliminé les divergences à l'origine d'instabilités dans la méthode de Slater.

Les éléments de matrice $H_{\alpha\beta}^{\text{LAPW}} \{\mathbf{k}\}$ et $S_{\alpha\beta}^{\text{LAPW}} \{\mathbf{k}\}$ se calculent comme précédemment pour la méthode des ondes planes augmentées. La contribution issue de l'intégration dans la région intersticielle est inchangée. La seule différence provient de la région sphérique.

$$H_{\alpha\beta}^{\text{LAPW}} \{\mathbf{k}\} = (\mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta) \frac{\hbar^2}{2m^\oplus \{R_s\}} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{4\pi R_s^2}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \frac{j_1 \{|\mathbf{K}_\alpha - \mathbf{K}_\beta| R_s\}}{|\mathbf{K}_\alpha - \mathbf{K}_\beta|} \right) \\ + \frac{4\pi R_s^4}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \left(\frac{\hbar^2}{2m^\oplus \{R_s\}} \right)^2 \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l \{\cos \theta_{\alpha\beta}\} \left(\mathcal{E}_l s_{\alpha\beta}^l + \gamma_{\alpha\beta}^l \right) \quad (10.94)$$

$$S_{\alpha\beta}^{\text{LAPW}} \{\mathbf{k}\} = \delta_{\alpha\beta} - \frac{4\pi R_s^2}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \frac{j_1 \{|\mathbf{K}_\alpha - \mathbf{K}_\beta| R_s\}}{|\mathbf{K}_\alpha - \mathbf{K}_\beta|} + \frac{4\pi R_s^4}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \left(\frac{\hbar^2}{2m^\oplus \{R_s\}} \right)^2 \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l \{\cos \theta_{\alpha\beta}\} s_{\alpha\beta}^l \quad (10.95)$$

avec en notant $\mathbf{q}_\alpha = \mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha$ et $\mathbf{q}_\beta = \mathbf{k} + \mathbf{K}_\beta$

$$s_{\alpha\beta}^l \equiv j_l' \{q_\alpha R_s\} j_l \{q_\beta R_s\} \left((\dot{u}_l)^2 + (u_l)^2 \right) + j_l \{q_\alpha R_s\} j_l \{q_\beta R_s\} \left((\dot{u}_l')^2 + N_l (u_l')^2 \right) \\ - \left(j_l' \{q_\alpha R_s\} j_l \{q_\beta R_s\} + j_l \{q_\alpha R_s\} j_l' \{q_\beta R_s\} \right) (\dot{u}_l \dot{u}_l' + N_l u_l u_l') \quad (10.96)$$

$$\gamma_{\alpha\beta}^l \equiv \dot{u}_l u_l' \left(j_l' \{q_\alpha R_s\} j_l \{q_\beta R_s\} + j_l \{q_\alpha R_s\} j_l' \{q_\beta R_s\} \right) \\ - \dot{u}_l' u_l j_l \{q_\alpha R_s\} j_l \{q_\beta R_s\} - \dot{u}_l u_l j_l' \{q_\alpha R_s\} j_l' \{q_\beta R_s\}. \quad (10.97)$$

Tandis que l'erreur introduite par la linéarisation est d'ordre quadratique pour la fonction d'onde, l'erreur dans les bandes d'énergies obtenues par diagonalisation est d'après le principe variationnel seulement de l'ordre du carré de l'erreur dans les fonctions d'ondes donc d'ordre $(\mathcal{E} - \mathcal{E}_l)^4$ (voir Koelling & Arbman (1975)).

Dans cette méthode, nous devons calculer u_l et \dot{u}_l à l'intérieur d'une sphère, qui sont les solutions d'une équation différentielle du type

$$-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{\hbar^2}{2m^\oplus \{r\}} \frac{d}{dr} y_l + \left(V\{r\} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m^\oplus \{r\} r^2} - \mathcal{E}_l \right) y_l = f\{r\}, \quad (10.98)$$

avec respectivement $f\{r\} = 0$ et $f\{r\} = u_l\{r\}$. Pour résoudre ce type d'équation à l'intérieur d'une sphère de rayon R_s , il est judicieux d'introduire une nouvelle variable sans dimension définie par

$$x \equiv \log\{r/R_s\}, \quad (10.99)$$

et de poser

$$Y_l\{x\} \equiv \sqrt{\frac{r}{R_s}} y_l\{r\}. \quad (10.100)$$

De cette façon, l'équation différentielle peut se réécrire sous la forme

$$\frac{d^2 Y_l}{dx^2} - \frac{dY_l}{dx} e^x R_s \frac{m^{\oplus'}}{m^{\oplus}} - Y_l \left(\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + e^{2x} (\tilde{V} - \tilde{\mathcal{E}}) - \frac{1}{2} e^x R_s \frac{m^{\oplus'}}{m^{\oplus}} \right) = -e^{5x/2} \tilde{f}. \quad (10.101)$$

Nous avons introduit des fonctions sans dimensions définies par

$$\tilde{V}\{r\} \equiv \frac{2m^{\oplus}\{r\}R_s^2}{\hbar^2} V\{r\}, \quad \tilde{\mathcal{E}}\{r\} \equiv \frac{2m^{\oplus}\{r\}R_s^2}{\hbar^2} \mathcal{E}, \quad \tilde{f}\{r\} \equiv \frac{2m^{\oplus}\{r\}R_s^2}{\hbar^2} f\{r\}. \quad (10.102)$$

Le changement de variables (10.99) et (10.100) permet ainsi d'éliminer les singularités en $r = 0$. L'équation différentielle sous la forme (10.101) s'intègre par la méthode de différences finies. En ce qui concerne les conditions initiales en $r = 0$, c'est-à-dire en $x \rightarrow -\infty$, l'équation (10.101) devient simplement

$$\frac{d^2 Y_l}{dx^2} \sim \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 Y_l, \quad (10.103)$$

qui admet deux types de solutions proportionnelles à

$$Y_l\{x\} = e^{\pm(l+1/2)x}. \quad (10.104)$$

La solution physiquement acceptable est celle qui reste bornée partout, en particulier à l'origine $r = 0$. Nous pouvons ainsi intégrer l'équation différentielle à partir d'une valeur de $x < 0$ suffisamment petite en utilisant la solution régulière $Y_l\{x\} = e^{(l+1/2)x}$ jusqu'à $x = 0$ ($r = R_s$).

10.3 Méthodes d'intégrations

Les propriétés physiques d'un solide s'expriment comme des valeurs moyennes sur l'ensemble des particules (électrons dans un solide, neutrons dans l'écorce d'une étoile à neutrons). Ceci se traduit dans le modèle des bandes par deux types de sommations, des intégrales dans la première zone de Brillouin (citons par exemple la densité de particules ou la densité d'énergie) et des intégrales sur la surface de Fermi (par exemple la densité d'états, le coefficient de mobilité). Nous allons détailler dans les sections suivantes, les deux principales méthodes qui ont été développées en physique du solide pour traiter numériquement ces deux types d'intégrations, d'une part la méthode des points spéciaux et d'autre part la méthode de Gilat-Raubenheimer. Ces méthodes ne sont généralement pas abordées dans les ouvrages « standards » de physique de solide. C'est pourquoi, nous nous efforcerons de préciser systématiquement les références vers les articles originaux.

10.3.1 Intégration dans la zone de Brillouin

Considérons tout d'abord les intégrales dans la première zone de Brillouin du type

$$\int_{\text{ZB}} \mathcal{F}\{\mathbf{k}\} d^3k, \quad (10.105)$$

où $\mathcal{F}\{\mathbf{k}\}$ est une fonction qui possède la périodicité du réseau réciproque, autrement dit $\mathcal{F}\{\mathbf{k} + \mathbf{K}\} = \mathcal{F}\{\mathbf{k}\}$.

Nous devons à Baldereschi (1973) d'avoir lancé l'idée d'une méthode d'intégration exploitant les symétries du cristal et réduisant au maximum le temps de calcul machine. Il suggéra ainsi de remplacer l'intégrale par le calcul de la fonction $\mathcal{F}\{\mathbf{k}\}$ en un seul point, \mathbf{k}_0 qu'il appela le point de valeur moyenne, dont la détermination ne dépend que de la symétrie du cristal considéré. Il en donna les coordonnées pour les trois réseaux cubiques (simple, centré, à faces centrées). Il s'avère que $\mathcal{F}\{\mathbf{k}_0\}$ fournit en général une bonne approximation de l'intégrale de $\mathcal{F}\{\mathbf{k}\}$ dans toute la zone de Brillouin, à quelques pourcents près lorsque la fonction \mathcal{F} est suffisamment lisse ! Cette méthode a été généralisée peu après par Chadi & Cohen (1973) à plusieurs points de symétrie d'où le nom de méthode des points spéciaux. Cette méthode a été adaptée aux réseaux bidimensionnels par Cunningham (1974).

En quoi consiste cette méthode ? Premièrement remarquons que seule la partie de la fonction $\mathcal{F}\{\mathbf{k}\}$ qui se transforme selon la représentation irréductible complètement symétrique (*i.e.* représentation identité) du groupe ponctuel ne contribue à l'intégrale (voir la discussion de l'équation (7.52) du chapitre 7). Dans la suite nous supposons pour alléger les notations que l'intégrand est déjà symétrique. Cela signifie que nous pouvons développer la fonction $\mathcal{F}\{\mathbf{k}\}$ en ondes planes symétrisées, qui sont aussi parfois appelées fonctions étoiles

$$\mathcal{S}_s\{\mathbf{k}\} = \frac{1}{|\mathcal{P}|} \sum_{\mathcal{P}} e^{i\mathcal{P}\mathbf{T}_s \cdot \mathbf{k}}, \quad (10.106)$$

$$\mathcal{F}\{\mathbf{k}\} = \sum_s \tilde{\mathcal{F}}_s \mathcal{S}_s\{\mathbf{k}\}. \quad (10.107)$$

Nous supposons que $|\mathbf{T}_{s_1}| \geq |\mathbf{T}_{s_2}|$ si et seulement si $s_1 > s_2$ ($\mathbf{T}_0 = \mathbf{0}$ de telle sorte que $\mathcal{S}_0\{\mathbf{k}\} = 1$). Il est facile de voir que ces ondes planes symétrisées sont purement réelles lorsque le groupe ponctuel contient l'inversion spatiale. Les ondes planes symétrisées sont orthogonales

$$\int_{\text{ZB}} d^3k \mathcal{S}_{s_1}\{\mathbf{k}\}^* \mathcal{S}_{s_2}\{\mathbf{k}\} = \frac{\mathcal{V}_{\text{ZB}}}{n_{s_1}} \delta_{s_1 s_2}, \quad (10.108)$$

où n_s est le nombre d'ondes planes indépendantes pour l'indice s , *i.e.* le nombre de vecteurs de translation du réseau inéquivalents de la forme $\mathcal{P}\mathbf{T}_s$. Les coefficients de la fonction $\mathcal{F}\{\mathbf{k}\}$ (dont seul celui pour $s = 0$ contribue à l'intégrale) s'expriment ainsi comme

$$\tilde{\mathcal{F}}_s = \frac{n_s}{\mathcal{V}_{\text{ZB}}} \int_{\text{ZB}} d^3k \mathcal{F}\{\mathbf{k}\} \mathcal{S}_s\{\mathbf{k}\}^*. \quad (10.109)$$

L'idée est de réécrire l'intégrale (10.105) comme une somme discrète sur un ensemble de points \mathbf{k}_j avec éventuellement un poids $w\{\mathbf{k}_j\}$ (lorsque ces points sont réduits à la zone irréductible) normalisé tel que

$$\sum_{j=1}^N w\{\mathbf{k}_j\} = 1, \quad (10.110)$$

$$\tilde{\mathcal{F}}_0 = \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{ZB}}} \int_{\text{ZB}} \mathcal{F}\{\mathbf{k}\} d^3k = \sum_{j=1}^N w\{\mathbf{k}_j\} \mathcal{F}\{\mathbf{k}_j\} + R_N, \quad (10.111)$$

où le reste R_N est simplement la différence entre l'intégrale et la somme discrète :

$$R_N = - \sum_{s>0} \tilde{\mathcal{F}}_s \sum_{j=1}^N w\{\mathbf{k}_j\} \mathcal{S}_s\{\mathbf{k}_j\}. \quad (10.112)$$

En choisissant l'ensemble des points \mathbf{k}_j de façon à ce que les ondes planes symétrisées s'annulent exactement pour toutes les valeurs de $s \leq s_{\text{max}}$, le reste R_N ne fait apparaître que des termes correspondants à des vecteurs de translation $|\mathbf{T}_s| \geq |\mathbf{T}_{s_{\text{max}}}|$ pour lesquels $\tilde{\mathcal{F}}_s$ est très petit devant $\tilde{\mathcal{F}}_0$ lorsque l'intégrand est suffisamment « lisse » (une fonction infiniment continûment différentiable lentement variable). La méthode de Baldereschi est ainsi de trouver un point \mathbf{k}_0 tel que

$$\sum_{\mathcal{P}} e^{i\mathcal{P}\mathbf{T}_s \cdot \mathbf{k}_0} = 0 \quad (10.113)$$

pour le plus grand nombre possible de valeurs de $s > 0$ (au plus $s = 3$ puisque ce système a pour inconnues les trois composantes de \mathbf{k}_0). Les coordonnées cartésiennes de ce point pour les trois structures cubiques sont $\mathbf{k}_0 = \pi/a(1/2, 1/2, 1/2)$ pour un réseau cubique simple, $\mathbf{k}_0 = 2\pi/a(0.6223, 0.2953, 0)$ pour un réseau cubique à faces centrées et $\mathbf{k}_0 = 2\pi/a(1/6, 1/6, 1/2)$ pour un réseau cubique centré. La position de ces points est illustrée sur la figure 10.2. Plus généralement, Chadi et Cohen ont donné une procédure pour obtenir par récurrence un ensemble de points spéciaux à partir de deux points donnés. Plusieurs auteurs ont ensuite fournis des formules pour obtenir de façon systématique les coordonnées de ces points et leur poids respectif (voir Monkhorst & Pack (1976), Macot & Frank (1990), Hama & Watanabe (1992), Rogan & Lagos (2001)).

Formules des points spéciaux et de leur poids

Nous redonnons ci-dessous les formules de Hama & Watanabe (1992). Les points spéciaux ont pour composantes cartésiennes (les unités de \mathbf{k}_j sont $2\pi/a$ pour le réseau cubique simple, $4\pi/a$ pour les réseaux cubique centré et cubique à faces centrées)

$$\mathbf{k}_j = \left((i_1 - 1/2)/N - 1/2, (i_2 - 1/2)/N - 1/2, (i_3 - 1/2)/N - 1/2 \right) \quad (10.114)$$

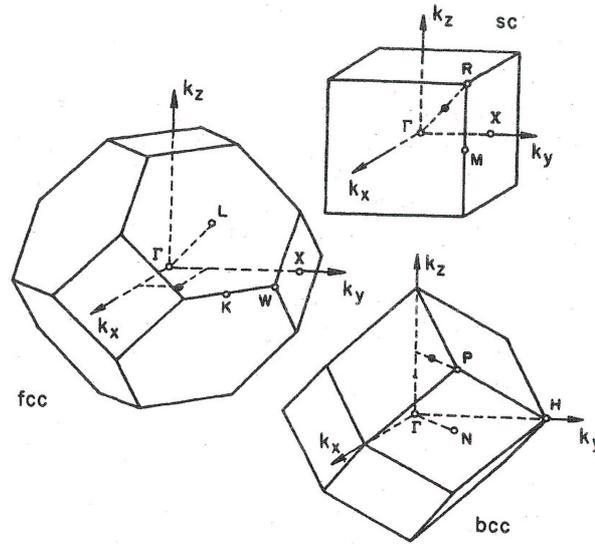


FIGURE 10.2 – Positions des points moyens de Baldereschi (1973) dans la première zone de Brillouin des réseaux cubiques : cubique simple (sc), cubique centré (bcc), cubique à faces centrées (fcc).

avec i_1, i_2, i_3 trois entiers satisfaisant

$$N \geq i_1 \geq i_2 \geq i_3 \geq (N + 1)/2. \quad (10.115)$$

Considérons séparément les trois structure cubiques.

★ **cubique simple**

Les poids sont donnés par

$$w\{\mathbf{k}_j\} = \frac{1}{N^3} \left((3 - \delta_{i_1, i_2})(3 - \delta_{i_2, i_3}) - 3 \right) \times \\ \times (2 - \delta_{2i_1, N+1})(2 - \delta_{2i_2, N+1})(2 - \delta_{2i_3, N+1}). \quad (10.116)$$

Le nombre total de points est égal à $(N - [N/2])(N - [N/2] + 1)(N - [N/2] + 2)/6$, en désignant par des crochets $[]$ la partie entière.

★ **cubique à faces centrées (N pair)**

Les indices i_1, i_2, i_3 sont restreints à la zone irréductible, ce qui signifie avec $i_0 = i_1 + i_2 + i_3$, que

$$4i_0 \leq 3(3N + 2) \quad (10.117)$$

$$4i_2 \geq 3N + 2 \text{ si } 4i_0 = 3(3N + 2). \quad (10.118)$$

Les poids sont donnés par

$$w\{\mathbf{k}_j\} = \frac{8}{N^3} \left(6 - 3(\delta_{i_1, i_2} + \delta_{i_2, i_3}) + \delta_{i_1, i_2} \delta_{i_2, i_3} \right) (2 - \delta_{4i_0, 9N+6} \delta_{4i_2, 3N+2}). \quad (10.119)$$

Le nombre total de points est égal à $(N+2)(N^2+10N-24[N/4])/96$.

★ **cubique centré (N pair)**

Les indices i_1, i_2, i_3 sont restreints à la zone irréductible, ce qui signifie avec $i_0 = i_1 + i_2$, que

$$2i_0 \leq 3N + 2. \quad (10.120)$$

Les poids sont donnés par

$$w\{\mathbf{k}_j\} = \frac{8}{N^3} \left(24 - 12(\delta_{i_1, i_2} + \delta_{i_2, i_3}) + 4\delta_{i_1, i_2} \delta_{i_2, i_3} - \delta_{2i_0, 3N+2} (12 - 6\delta_{i_1, i_2} - 4\delta_{i_2, i_3} + \delta_{i_1, i_2} \delta_{i_2, i_3}) \right). \quad (10.121)$$

Le nombre total de points est égal à $(N+4)(N^2+14N-24[N/4])/192$.

Convergence

La convergence de la méthode des points spéciaux est exponentielle comme le montre la figure 10.3 pour le calcul de l'intégrale $\int_{\text{zB}} k^2 d^3k$, qui est respectivement égale à $1/4, 3/8, 19/32$ en unités de $(2\pi/a)^2$, pour un réseau cubique simple, cubique centré, cubique à faces centrées. Cependant, l'intégrale dans la première zone de Brillouin peut parfois faire intervenir des fonctions discontinues. C'est le cas notamment pour des intégrales dans le volume de Fermi à température nulle. La présence d'une surface de Fermi (matériaux métalliques et semiconducteurs) conduit alors à une convergence beaucoup plus lente. Pour remédier à cette perte de convergence, l'idée est de lisser la surface de Fermi, de la rendre diffuse de telle sorte que la fonction à intégrer ne soit plus discontinue.

Méthodes de lissage

Différentes méthodes de lissage ont été proposées. Nous avons utilisé la méthode de Methfessel & Paxton (1989). La distribution de Dirac $\delta\{x\}$ est représentée par un développement en polynômes d'Hermite $H_n\{x\}$ sous la forme

$$\delta\{x\} = \sum_{n=0}^{+\infty} A_n H_{2n}\{x\} e^{-x^2}, \quad (10.122)$$

où les coefficients A_n sont déterminés de façon unique par

$$A_n = \frac{(-1)^n}{n! 4^n \sqrt{\pi}}, \quad (10.123)$$

en utilisant la relation d'orthogonalité des polynômes d'Hermite

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n\{x\} H_m\{x\} e^{-x^2} dx = n! 2^n \sqrt{\pi} \delta_{nm}. \quad (10.124)$$

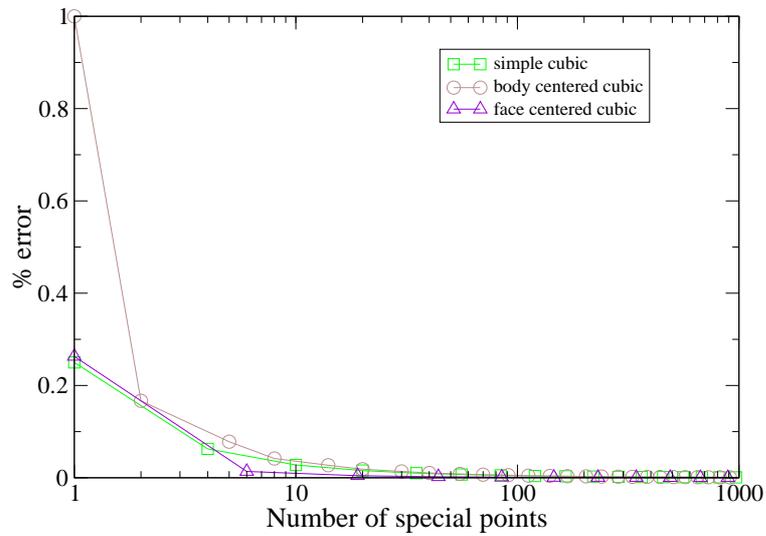


FIGURE 10.3 – Erreur relative dans le calcul de l'intégrale $\int_{\text{ZB}} k^2 d^3k$ par la méthode des points spéciaux.

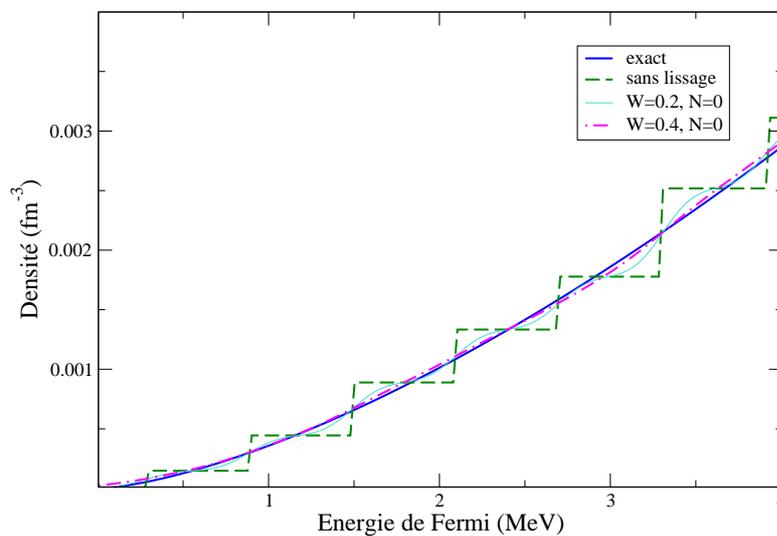


FIGURE 10.4 – Densité de particules en fonction de l'énergie de Fermi pour le modèle du gaz de neutron dans un réseau vide (réseau cubique centré, constante de réseau = 30 fm), calculée avec la méthode de Baldereschi (1973) et différents lissages selon la procédure de Methfessel & Paxton (1989).

Cette représentation suggère d'approximer la distribution de Dirac par une somme finie

$$D_N\{x\} = \sum_{n=0}^N A_n H_{2n}\{x\} e^{-x^2}. \quad (10.125)$$

L'intérêt de cette distribution $D_N\{x\}$ réside dans la propriété que pour n'importe quel polynôme de degré inférieur ou égal à $2N + 1$, nous avons

$$\int_{-\infty}^{\infty} D_N\{x\} P\{x\} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta\{x\} P\{x\} dx = P\{0\}. \quad (10.126)$$

Ceci suggère d'introduire une distribution de Heaviside approchée en intégrant la distribution $D_N\{x\}$

$$\vartheta_N\{x\} = \int_{-\infty}^x D_N\{y\} dy. \quad (10.127)$$

En utilisant l'identité

$$\frac{d}{dx} \left(H_n\{x\} e^{-x^2} \right) = -H_{n+1}\{x\} e^{-x^2}, \quad (10.128)$$

l'intégrale se simplifie sous la forme

$$\vartheta_0\{x\} = \frac{1}{2} (1 + \operatorname{erf}\{x\}), \quad (10.129)$$

$$\vartheta_N\{x\} = \vartheta_0\{x\} - \sum_{n=1}^N A_n H_{2n-1}\{x\} e^{-x^2}. \quad (10.130)$$

La fonction $\operatorname{erf}\{x\}$ est la fonction erreur définie par

$$\operatorname{erf}\{x\} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy. \quad (10.131)$$

Cette distribution a la propriété que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \vartheta_N\{x\} P\{x\} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \vartheta\{x\} P\{x\} dx, \quad (10.132)$$

si $P\{x\}$ est un polynôme de degré inférieur ou égal à $2N$.

La méthode de lissage pour l'intégration dans le volume de Fermi d'une fonction $\mathcal{F}\{k\}$ analytique, consiste à remplacer la distribution de Fermi par une distribution approchée. Ainsi l'intégrale dans la zone de Brillouin d'une fonction discontinue se réduit à l'intégrale d'une fonction analytique

$$\int_{\text{zB}} \mathcal{F}\{\mathbf{k}\} \vartheta\{\mu - \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}\} d^3k \simeq \int_{\text{zB}} \mathcal{F}\{\mathbf{k}\} \vartheta_N\left\{ \frac{\mu - \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}}{W} \right\} d^3k, \quad (10.133)$$

où W est un paramètre de lissage, homogène à une énergie. L'intégrale se présente alors sous une forme particulièrement bien adaptée pour le calcul par la méthode des points

spéciaux. La convergence de l'intégrale approchée est exponentielle. Néanmoins, le résultat obtenu n'est rigoureusement égal à celui de l'intégrale exacte que dans la limite $N \rightarrow +\infty$ ou $W \rightarrow 0$, et par conséquent dépend du lissage employé à travers les paramètres W et N . Toutefois, lorsque la fonction $\mathcal{F}\{\mathbf{k}\}$ est suffisamment régulière, les erreurs introduites par l'emploi d'une distribution de Fermi lissée sont négligeables. Plus précisément, en remarquant que

$$\int_{\text{zB}} \mathcal{F}\{\mathbf{k}\} \vartheta\{\mu - \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}\} d^3k = \int_{-\infty}^{+\infty} F\{\mathcal{E}\} d\mathcal{E}, \quad (10.134)$$

$$F\{\mathcal{E}\} \equiv \int_{\text{zB}} \mathcal{F}\{\mathbf{k}\} \delta\{\mu - \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}\} d^3k \quad (10.135)$$

et par les propriétés de la distribution de Heaviside lissée, nous pouvons en conclure que si la fonction $F\{\mathcal{E}\}$ peut être représentée par un polynôme de degré inférieur ou égal à $2N$ dans le voisinage de l'énergie de Fermi de l'ordre de grandeur de W alors la substitution de la distribution de Heaviside ϑ par ϑ_N n'aura aucune influence sur le résultat.

L'avantage de la méthode de Methfessel et Paxton, est qu'elle permet ainsi de contrôler la convergence en variant les paramètres W et N . Cette procédure est illustrée sur la figure 10.4 par le test de Shockley (1937) du réseau vide. Nous avons calculé la densité de neutrons n_n en fonction de l'énergie de Fermi μ dans un réseau cubique centré vide de constante $a = 30$ fm. Le résultat exact de l'intégration est donné par la formule

$$n_n = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{\sqrt{2m\mu}}{\hbar} \right)^3. \quad (10.136)$$

Le résultat de l'intégration par la méthode de Baldereschi est pratiquement indépendant de N et converge vers le résultat exact lorsque l'énergie de lissage W est supérieure à environ 1 MeV. Nous voyons sur la figure qu'avec seulement un seul terme ($N = 0$) pour la distribution approchée, nous pouvons déjà obtenir des résultats très proches du résultat exact.

10.3.2 Intégration sur la surface de Fermi

Le calcul de quantités physiques à température nulle fait souvent intervenir des intégrales sur la surface de Fermi, comme pour le tenseur de mobilité. Ce type de calculs est numériquement très lourd parce qu'il nécessite un échantillonnage fin de la surface de Fermi. Au contraire, nous avons vu que les intégrations dans la première zone de Brillouin peuvent être calculées, avec une erreur de quelques pourcents seulement, en remplaçant l'intégrale par une somme sur quelques points bien choisis.

Les calculs précis d'intégrales de surface sont basés sur un ensemble de méthodes dites « analytiques » dont l'origine remonte au milieu des années soixantes, aux travaux de Gilat & Raubenheimer (1966) (pour une revue des méthodes antérieures, voir Gilat (1972)). Le problème était alors de calculer la densité d'états pour les phonons dans un cristal, un calcul particulièrement délicat puisque l'intégrand présente des points critiques

comme cela a été discuté en détails au chapitre 7. L'idée est tout d'abord de découper la première zone de Brillouin en un grand nombre de cellules, puis d'approcher localement dans chacune de ces cellules, la surface de Fermi par un plan. En supposant que l'intégrand est constant dans chaque cellule, il est alors possible d'obtenir une expression analytique de l'intégrale dans la cellule et d'en déduire par sommation sur toutes les cellules l'intégrale sur la surface de Fermi. Cette méthode a été appliquée tout d'abord avec des cellules cubiques puis généralisée à d'autres types de cellules, (voir Raubenheimer & Gilat (1967), Kam & Gilat (1968), Jepsen & Andersen (1971), Lehmann & Taut (1972), Gilat (1982)) en particulier des tétraèdres. En effet le domaine irréductible de la zone de Brillouin peut toujours se décomposer en tétraèdres, ce qui n'est pas le cas des cubes ou des parallélépipèdes (pour une discussion sur le choix entre cube et tétraèdre voir Gilat & Bharatiya (1975)).

Il existe plusieurs schémas de linéarisation. Dans la méthode originelle de Gilat et Raubenheimer (GR), l'énergie dans une cellule est approchée par son développement de Taylor au premier ordre par rapport au centre de la cellule. L'énergie est donc extrapolée. La méthode de GR nécessite la connaissance de l'énergie et de son gradient, ce qui peut être numériquement lourd. C'est pourquoi, une simplification importante a été apportée indépendamment par Jepsen & Andersen (1971) d'une part, Lehmann & Taut (1972) d'autre part en choisissant d'interpoler l'énergie dans une cellule (tétraèdre) par ses valeurs aux sommets (pour une discussion sur la méthode de GR et celle des tétraèdres, voir Taut (1998)).

Gilat & Kam (1969a) ont montré comment généraliser cette méthode lorsque l'intégrand n'est plus supposé constant dans chaque cellule mais varie linéairement. Des méthodes hybrides ont vu le jour dans lesquelles une interpolation quadratique de l'énergie et/ou de l'intégrand à l'intérieur de mésocellules est utilisée pour le développement linéaire dans les cellules de GR (voir Janak (1969), Janak *et al.* (1970), Cooke & Wood (1972)). MacDonald *et al.* (1979) ont étendu la méthode des tétraèdres pour le calcul d'intégrales dans la zone de Brillouin (pour une présentation récente voir Zaharioudakis (2004)) mais la convergence est en générale plus lente que par la méthode des points spéciaux (voir Hama & Watanabe (1992)). Plusieurs améliorations ont été apportées à la méthode des tétraèdres par Blöchl *et al.* (1994). Une méthode basée sur une interpolation quadratique de l'énergie et de l'intégrand a été également proposée par Wiesenekker & Baerends (1991). La méthode de GR a également été adapté aux réseaux bidimensionnels pour le calcul de la structure électronique des films par Jepsen *et al.* (1978). La méthode des tétraèdres est devenue la méthode des triangles (voir également Wiesenekker *et al.* (1988), Pulci *et al.* (1998), Lee *et al.* (2002)). Nous allons maintenant traiter plus en détail la méthode originelle de GR après ce bref historique.

Méthode de Gilat-Raubenheimer

Nous ne discuterons que le cas de cristaux cubiques puisque ce sont les types de structures qui sont attendues dans l'écorce d'une étoile à neutrons (plus précisément cubique centrée). L'objectif de cette section est de décrire la méthode de GR pour le

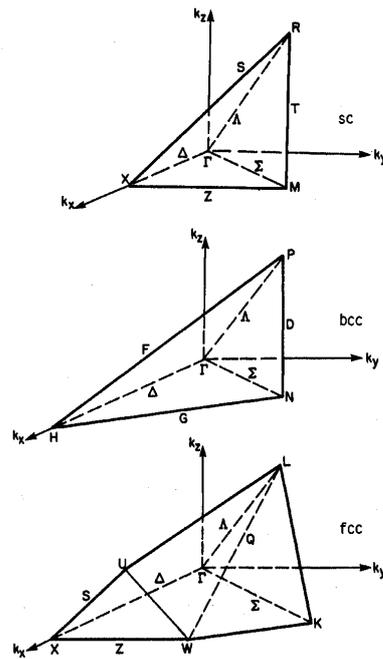


FIGURE 10.5 – Domaine irréductible de la première zone de Brillouin des réseaux cubiques : cubique simple (sc), cubique centré (bcc), cubique à faces centrées (fcc), avec les points et lignes de symétries (source : Szmulowicz & Wendeln (1982)).

calcul d'intégrales sur la surface de Fermi, du type

$$\oint \mathcal{F}\{\mathbf{k}\} dS. \quad (10.137)$$

Tout d'abord, nous avons vu que la première zone de Brillouin est partitionnée en domaines irréductibles (48 exactement pour des réseaux cubiques), illustrés sur la figure 10.5. Puisqu'un seul domaine contient déjà toute l'information sur le spectre d'énergie, l'intégrale sur la surface de Fermi se factorise naturellement lorsque la fonction $\mathcal{F}\{\mathbf{k}\}$ ne dépend que de l'énergie, et plus généralement lorsque cette fonction possède la symétrie du réseau réciproque. Ce qui est justement le cas pour le calcul de la trace du tenseur de mobilité qui fait intervenir le gradient de l'énergie. Ce domaine est ensuite découpée en petits cubes, tous identiques de largeur $2b$. A l'intérieur de chaque cube, l'énergie (pour chaque bande) est développée au premier ordre en série de Taylor autour de sa valeur au centre du cube :

$$\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \mathcal{E}\{\mathbf{k}_c\} + (\mathbf{k} - \mathbf{k}_c) \cdot \hbar \mathbf{v}_c + O\{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_c)^2\}, \quad (10.138)$$

$$v_c^i = \left. \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_i} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_c} \equiv \frac{1}{\hbar} \nabla^i \mathcal{E}\{\mathbf{k}_c\} \quad (10.139)$$

Ainsi la surface de Fermi, qui est l'ensemble des points satisfaisant $\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = \mu$ est, dans cette approximation, un plan perpendiculaire à $\nabla_i \mathcal{E}\{\mathbf{k}_c\}$ (donc pas nécessairement un plan tangent à la surface si celle-ci ne passe pas par \mathbf{k}_c !) dont l'équation est donnée par

$$\mu = \mathcal{E}\{\mathbf{k}_c\} + (\mathbf{k} - \mathbf{k}_c) \cdot \hbar \mathbf{v}_c. \quad (10.140)$$

La distance u de ce plan au centre du cube est égale au produit scalaire de $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_c)$ où \mathbf{k} est un point du plan avec le vecteur unitaire normal au plan, qui n'est autre que v_c^i/v_c . Finalement,

$$u = \frac{|\mu - \mathcal{E}\{\mathbf{k}_c\}|}{|\nabla \mathcal{E}\{\mathbf{k}_c\}|}. \quad (10.141)$$

Connaissant la valeur de l'énergie et de son gradient au centre de chaque cube, Gilat et Raubenheimer ont calculé les expressions analytiques de l'aire S_c de la portion de la surface de Fermi qui intersecte chaque cube en fonction de u :

$$\star h_1 \geq h_2 + h_3$$

$$S_c\{u\} = 4b^2/h_1$$

$$\star h_1 < h_2 + h_3$$

$$\star 0 \leq u \leq u_1$$

$$S_c\{u\} = \left(2b^2(h_1h_2 + h_2h_3 + h_3h_1) - (u^2 + b^2) \right) / (h_1h_2h_3)$$

$$\star u_1 \leq u \leq u_2$$

$$S_c\{u\} = \left(b^2(3h_2h_3 + h_2h_1 + h_3h_1) - bu(-h_1 + h_2 + h_3) - 1/2(u^2 + b^2) \right) / (h_1h_2h_3)$$

$$\star u_2 \leq u \leq u_3$$

$$S_c\{u\} = 2 \left(b^2h_3(h_1 + h_2) - buh_3 \right) / (h_1h_2h_3)$$

$$\star u_3 \leq u \leq u_4$$

$$S_c\{u\} = \left(b(h_1 + h_2 + h_3) - u \right)^2 / (2h_1h_2h_3)$$

h_1, h_2, h_3 sont les composantes cartésiennes de v^i/v (cosinus directeurs) ordonnées telles que $h_1 \geq h_2 \geq h_3 \geq 0$, et u_1, u_2, u_3, u_4 sont définis par

$$u_1 = b|h_1 - h_2 - h_3|$$

$$u_2 = b(h_1 - h_2 + h_3)$$

$$u_3 = b(h_1 + h_2 - h_3)$$

$$u_4 = b(h_1 + h_2 + h_3).$$

En négligeant la variation de la fonction $\mathcal{F}\{\mathbf{k}\}$ dans un cube, l'intégrale (10.137) sur la surface de Fermi est approchée par une somme sur chaque cellule, notée c ,

$$\oint \mathcal{F}\{\mathbf{k}\} dS \simeq \sum_c w_c \mathcal{F}\{\mathbf{k}_c\} S_c\{u\}, \quad (10.142)$$

où w_c sont des poids qui tiennent compte du fait que certains cubes débordent du domaine irréductible. La détermination de ces poids a été discutée par Janak (1971), Szmulowicz & Wendeln (1982).

Les centres des cubes sont disposés dans la première zone de Brillouin aux points de coordonnées cartésiennes

$$k_x = (2i_1 + 1)b, \quad k_y = (2i_2 + 1)b, \quad k_z = (2i_3 + 1)b \quad (10.143)$$

où i_1, i_2, i_3 sont des entiers variant entre 0 et $N - 1$, et b est fixé de façon à ce que N cubes remplissent le domaine irréductible selon l'axe Δ (voir figure 10.5). Nous allons maintenant discuter plus en détail chaque cas. Nous noterons a la constante de réseau (l'arête du cube conventionnel).

★ réseau cubique simple

Le domaine irréductible est défini par la région de la première zone de Brillouin délimitée par

$$\frac{\pi}{a} \geq k_x \geq k_y \geq k_z \geq 0, \quad (10.144)$$

soit en posant $b = \pi/2aN$,

$$N - 1 \geq i_1 \geq i_2 \geq i_3 \geq 0. \quad (10.145)$$

Le nombre total de cubes est $N(N + 1)(N + 2)/6$. Il est facile de voir sur la figure 10.5 que les cubes dont les centres sont disposés dans le plan $k_x = k_y$ sont coupés en deux par le bord de la zone irréductible ΓMR . Par ailleurs puisque ce plan est un plan de symétrie, $\nabla_i \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}$ est parallèle au plan pour $\mathbf{k} \in \Gamma\text{MR}$. Par conséquent la « surface » (plan) de Fermi est parallèle au plan ΓXM . La surface de Fermi dans les cubes situés dans le plan $k_x = k_y$, est donc coupée en deux par le bord ΓMR , c'est-à-dire que ces cubes ont un poids $w_c = 1/2$. Plus généralement, les cubes qui sont coupés par des plans réticulaires dont les indices de Miller sont (110) ont un poids $w_c = 1/2$. Etudions maintenant le cas des cubes dont les centres sont alignés le long de l'axe Λ qui est l'intersection des plans ΓMR et ΓXR . Puisque ces derniers sont des plans de symétries, $\nabla_i \mathcal{E}\{\mathbf{k}\}$ est contenu dans les deux plans, donc est parallèle à l'axe Λ . Autrement dit la surface de Fermi est perpendiculaire à cet axe. Comme illustré sur la figure 10.6, seul $1/6$ de la surface de Fermi dans un petit cube est à l'intérieur du domaine irréductible. Et plus généralement, les cubes dont les centres sont le long de la droite d'intersection de deux plans (110) ont un poids $w_c = 1/6$. Les poids pour la structure cubique simple sont résumés dans le tableau 10.1.

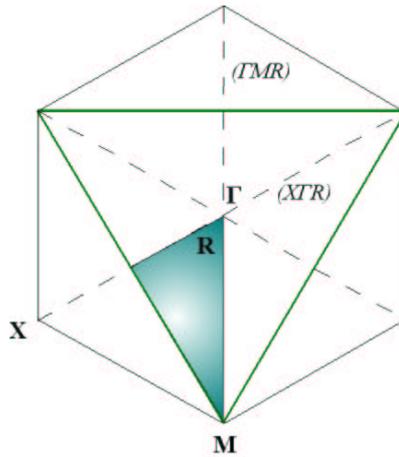


FIGURE 10.6 – Détermination des poids dans la méthode de GR, pour des cubes dont le centre est situé à l'intersection de deux plans de type (110). La figure représente une vue le long de l'axe Λ dans la première zone de Brillouin d'un réseau cubique simple, d'une cellule cubique située le long de cet axe. Le triangle en trait plein représente la portion de la surface de Fermi qui intersecte le cube et le triangle plein la partie située dans la zone irréductible.

TABLEAU 10.1 – Poids pour la méthode de GR dans un réseau cubique simple

ligne ou plan de symétrie	w_c
Λ	1/6
Γ MR, XTR	1/2

★ **réseau cubique centré**

Le domaine irréductible est défini par la région de la première zone de Brillouin délimitée par

$$\frac{2\pi}{a} \geq k_x \geq k_y \geq k_z \geq 0, \quad k_x + k_y \leq \frac{2\pi}{a} \tag{10.146}$$

soit en posant $b = \pi/aN$,

$$N - 1 \geq i_1 \geq i_2 \geq i_3 \geq 0, \quad i_1 + i_2 \leq N - 1. \tag{10.147}$$

Le nombre de cubes est $N(N + 2)(N + 4)/24$ si N est pair, $(N + 1)(N + 2)(N + 3)/24$ sinon. Les poids pour le réseau cubique centré sont résumés dans le tableau 10.2.

★ **réseau cubique à faces centrées**

Le domaine irréductible est défini par la région de la première zone de Brillouin délimitée par

$$\frac{2\pi}{a} \geq k_x \geq k_y \geq k_z \geq 0, \quad k_x + k_y + k_z \leq \frac{3\pi}{a} \tag{10.148}$$

Comme discuté par Janak *et al.* (1970), cette structure est particulière parce que

TABLEAU 10.2 – Poids pour la méthode de GR dans un réseau cubique centré

ligne ou plan de symétrie	w_c
F, Λ , D	1/6
Γ PN, HNP, H Γ P	1/2

TABLEAU 10.3 – Poids pour la méthode de GR dans un réseau cubique à faces centrées

ligne ou plan de symétrie	w_c
Λ	1/6
Γ LK, X Γ L, ULKW	1/2
LK, UL	1/4

certains cubes ont une partie à l'intérieur de la zone irréductible mais leur centre est situé à l'extérieur. Cela signifie qu'il faut inclure des cubes dont les centres ne sont pas dans le domaine irréductible :
soit en posant $b = \pi/aN$,

$$N - 1 \geq i_1 \geq i_2 \geq i_3 \geq 0, \quad 2(i_1 + i_2 + i_3) \leq 3N - 1. \quad (10.149)$$

Finalement, le nombre de cubes est $N(N + 2)(2N + 5)/24$ si N est pair, $(N + 1)(4N^2 + 17N + 9)/48$ si N et $(N - 1)/2$ sont impairs et $(N + 3)(4N^2 + 9N - 1)/48$ sinon.

Les cubes dont les centres sont à l'extérieur du domaine irréductible, tradlatés par un vecteur du réseau réciproque se retrouvent à l'intérieur du domaine opposé. Ces cubes ont donc un poids $w_c = 1/2$. Par ailleurs, comme l'ont souligné Szmulowicz & Wendeln (1982), les cubes dont les centres sont sur l'axe LK ou LU, à l'intersection entre un plan (110) et (111), ont un poids $w_c = 1/4$. Les poids sont résumés dans le tableau 10.3.

Calcul du gradient de l'énergie

Il existe essentiellement trois types de méthodes pour le calcul du gradient $\nabla_i \mathcal{E}\{\mathbf{k}_c\}$:

★ calcul analytique

Malheureusement, l'expression analytique de l'énergie $\mathcal{E}\{\mathbf{k}\}$ n'est pas connue en général, sauf dans quelques cas académiques qui sont plutôt utilisés pour tester des méthodes numériques.

★ calcul par le théorème de Hellman-Feynman

L'application de ce théorème, discutée dans la section 10.1.2, est de loin la méthode la plus fiable pour le calcul du gradient. Elle a été suggérée pour la première fois par Cooke *et al.* (1975) bien qu'elle ait été utilisée implicitement par Gilat & Dolling (1964) sous la forme d'un développement de perturbation. Cette méthode est d'ailleurs « analytique » d'une certaine façon. Remarquons que le calcul de la vitesse est particulièrement simple dans le cas des ondes planes (voir équation (10.32)).

★ calcul par interpolation

Le calcul du gradient est approché par des différences finies $\nabla_i \mathcal{E}\{\mathbf{k}_c\} \simeq \delta \mathcal{E} / \delta k_i$. Cette méthode exige le calcul de l'énergie pour des points \mathbf{k} dans le voisinage de \mathbf{k}_c , et donc autant de diagonalisations. Cette méthode est donc a priori non seulement moins précise mais aussi plus lente que la méthode précédente. En pratique, cependant une même interpolation de l'énergie est utilisée pour le calcul du gradient en plusieurs points. Ce qui permet ainsi d'augmenter sensiblement le nombre de cellules par rapport à l'application du théorème de Hellman-Feynman pour un temps de calcul donné. Le gain est particulièrement important lorsque le temps de calcul de la matrice de l'Hamiltonien est du même ordre de grandeur que le temps pour la diagonalisation.

Méthode des tétraèdres

La méthode des tétraèdres est apparue suite à deux limitations de la méthode de GR. En premier lieu, le choix de cellules cubiques ou orthorhombique n'est pas toujours très adapté (Gilat & Kam (1969b) ont montré comment généraliser les formules de la surface de GR dans le cas de cellules orthorhombiques). C'est la raison pour laquelle, il a été suggéré d'utiliser des tétraèdres, notamment parce que le domaine irréductible de n'importe quelle zone de Brillouin peut toujours se décomposer en tétraèdres, ce qui n'est pas le cas des cubes ou des parallélépipèdes. De plus, la méthode de GR nécessite le calcul des bandes d'énergie dans un voisinage de l'énergie de Fermi et de leur gradient pour chaque cellule. Le calcul du gradient peut être numériquement très lourd, en particulier si la précision recherchée exige un grand nombre de cellules, comme pour le calcul de la densité d'états.

Jepsen & Andersen (1971), et indépendamment Lehmann & Taut (1972) ont donc proposé d'interpoler l'énergie dans un tétraèdre par ses valeurs aux sommets. Il n'est donc plus nécessaire de connaître le gradient de l'énergie. C'est ce qui a donné naissance à la méthode des tétraèdres qui est aujourd'hui très répandue en physique du solide. L'aire de la portion de la surface de Fermi qui intersecte chaque tétraèdre peut être calculée analytiquement. Pour une discussion sur le choix entre cube et tétraèdre voir Gilat & Bharatiya (1975). Pour une discussion sur la méthode de GR et celle des tétraèdres, voir Taut (1998). Enfin, Gilat (1982) a montré comment obtenir les expressions analytiques de la surface pour des cellules de forme quelconque. Un des prix à payer de cette méthode est qu'il n'est plus possible de faire un calcul point par point. En pratique, les énergies aux sommets de tous les tétraèdres sont d'abord calculées (notamment pour éviter de refaire le même calcul pour les tétraèdres qui partagent les mêmes sommets) et ensuite seulement l'intégration est effectuée. Ce qui signifie qu'il faut stocker toutes les données en mémoire.

Sources d'erreurs

Janak (1971) distingue deux types d'erreurs : les erreurs d'attribution et les erreurs de surface. La première provient directement de la linéarisation de l'énergie à l'intérieur de chaque cube, d'ordre b^2 . La seconde vient du fait que l'aire de la surface du plan qui intersecte le petit cube n'est pas tout à fait égale à l'aire de la surface de Fermi. Cette erreur est aussi d'ordre b^2 en général.

Jusqu'à présent, la sommation sur les bandes était implicite. Dans la méthode de GR, la contribution d'un petit cube à l'intégrale est une somme sur toutes les bandes d'énergie au point \mathbf{k}_c telles que $u \leq \sqrt{3}b$. Autrement dit la surface de Fermi coupe le petit cube s'il existe des bandes dont l'énergie en \mathbf{k}_c est telle que $|\mu - \mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}_c\}| \leq \sqrt{3}b|\nabla\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}_c\}|$. La présence de plusieurs bandes dans le spectre d'énergie donne lieu à d'autres problèmes, liés à la façon d'étiqueter les bandes d'énergie. En choisissant de numéroter les bandes par ordre d'énergie croissante, ceci garantit que l'énergie $\mathcal{E}\{\mathbf{k}\}$ est continue. En revanche, l'énergie n'est pas nécessairement analytique, en particulier les dérivées peuvent être discontinues pour certains points de symétrie comme illustré sur la figure. C'est la raison pour laquelle, l'ensemble des centres des cubes ont été choisis de façon à éviter au maximum les lignes et plans de symétrie. Gilat & Dolling (1964) discute d'une erreur spécifique aux réseaux cubiques, liée à l'axe Λ .

En particulier, lorsque deux bandes se croisent une interpolation de l'énergie conduit à des valeurs de $\nabla_i\mathcal{E}$ beaucoup trop faibles. Ceci a des conséquences dramatiques pour le calcul de la densité d'états par exemple puisque à chaque croisements de bandes, une interpolation donne lieu à des singularités « fantômes » (voir Gilat (1973), Cooke *et al.* (1975)). D'ailleurs ce problème persiste lorsque le nombre de cellules est augmenté ce qui réduit la convergence de cette méthode. Au contraire ce problème disparaît lorsque le gradient est calculé par le théorème de Hellman-Feynman. Par contre, lorsque des bandes sont proches de telle sorte que le gradient de l'énergie varie sensiblement dans une cellule, les erreurs dues à la l'extrapolation deviennent importantes.

Comme nous ne considérons que des structures cubiques, et comme le but est de calculer le tenseur de mobilité qui nécessite le calcul de la vitesse nous avons décidé d'implémenter la méthode originelle de GR.

Une façon de tester cette méthode est de calculer la densité d'états du « cubium » dont les expressions analytiques sont connues (voir Jelitto (1969), Morita & Horiguchi (1971b, 1971a)). Cet élément fictif est un modèle à une bande dont la relation de dispersion est donnée par

$$\mathcal{E}\{\mathbf{k}\} = -(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z). \quad (10.150)$$

Cette expression provient de l'approximation des liaisons fortes pour une bande de type s dans un réseau cubique simple. Les résultats sont représentés sur les figures 10.7.

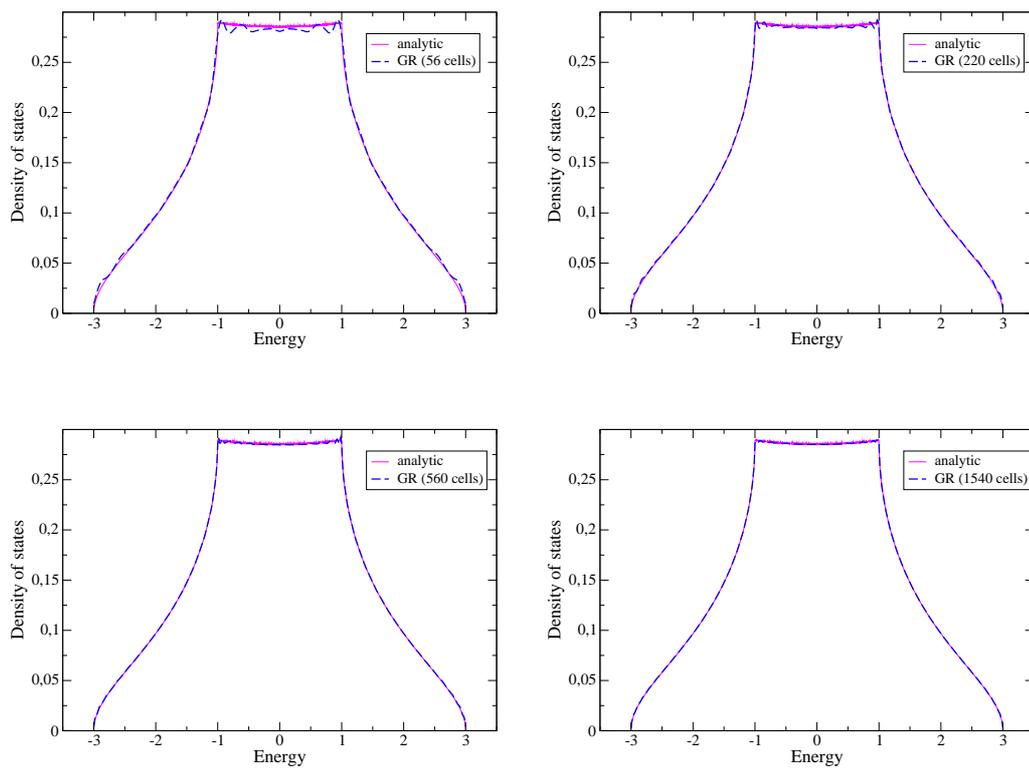


FIGURE 10.7 – Densité d'états du « cubium » calculée par la méthode de GR, comparée aux expressions analytiques de Morita & Horiguchi (1971b).

Chapitre 11

Résultats

Sommaire

11.1 Couches peu profondes de l'écorce interne	269
11.2 Couches profondes de l'écorce	287
11.3 Evolution de la masse effective à travers l'écorce interne . . .	306
11.4 Calculs Hartree-Fock autocohérents	308
11.5 Modèle à deux fluides et effets d'entraînement	315

La résolution des équations Hartree-Fock autocohérentes dans la théorie des bandes, est numériquement très lourde même avec des interactions effectives de contact. La difficulté technique provient principalement de l'application des conditions aux limites de Bloch. C'est pourquoi, nous explorerons tout d'abord le comportement qualitatif de la masse effective « mésoscopique » et des coefficients d'entraînement dans l'écorce d'une étoile à neutrons, à l'aide de modèles plus phénoménologiques. Ceci nous permettra d'éclaircir l'origine de ces masses effectives mésoscopiques et d'en déduire certaines tendances. Nous terminerons ce chapitre par la présentation d'un calcul Skyrme-Hartree-Fock.

11.1 Couches peu profondes de l'écorce interne

11.1.1 Modèle

Nous allons estimer les coefficients d'entraînement au voisinage de la transition entre l'écorce externe et l'écorce interne. Nous avons utilisé pour cela les résultats du modèle de goutte liquide compressible de Douchin *et al.* (2000). Comme les noyaux dans cette région sont très éloignés les uns des autres, typiquement une centaine de fermis alors que la taille des noyaux est seulement de l'ordre d'une petite dizaine de fermis, les simplifications introduites par le modèle de la goutte liquide sont donc une assez bonne approximation.

Nous allons reprendre plus en détail, la description du modèle de la goutte liquide, présenté dans le chapitre 6. Dans l'approximation de W-S, l'énergie d'une cellule se décompose sous la forme

$$E_{\text{cell}} = E_{\text{N}} + E_{\text{C}} + E_{\text{e}}, \quad (11.1)$$

dans laquelle E_{N} est l'énergie des nucléons (sans l'interaction coulombienne), E_{C} l'énergie coulombienne et enfin E_{e} l'énergie cinétique du gaz d'électrons. En supposant que les électrons forment un gaz de Fermi relativiste uniforme, nous avons

$$E_{\text{e}} = \varepsilon_{\text{e}} \mathcal{V}_{\text{cell}}, \quad (11.2)$$

où $\mathcal{V}_{\text{cell}}$ est le volume de la cellule de W-S et ε_{e} la densité d'énergie du gaz d'électrons dont nous rappelons l'expression

$$\varepsilon_{\text{e}} = \frac{m_{\text{e}}^4 c^5}{8\pi^2 \hbar^3} \left(x_{\text{e}} (2x_{\text{e}}^2 + 1) \sqrt{x_{\text{e}}^2 + 1} - \ln\{x_{\text{e}} + \sqrt{x_{\text{e}}^2 + 1}\} \right), \quad (11.3)$$

avec $x_{\text{e}} = (3\pi^2 n_{\text{e}})^{1/3} \hbar / m_{\text{e}} c$.

La contribution nucléaire est la somme d'une énergie volumique $E_{\text{N,vol}}$ et d'une énergie surfacique $E_{\text{N,surf}}$. L'énergie volumique est donnée par

$$E_{\text{N,vol}} = \varepsilon\{n_{\text{i}}, x_{\text{i}}\} \mathcal{V}_{\text{nuc}} + \varepsilon\{n_{\text{o}}, 0\} (\mathcal{V}_{\text{cell}} - \mathcal{V}_{\text{nuc}}), \quad (11.4)$$

où n_{i} et x_{i} sont respectivement la densité de nucléons et la fraction protonique à l'intérieur des noyaux de volume \mathcal{V}_{nuc} , et n_{o} la densité du gaz de neutrons. Il est important de remarquer que dans cette approche les neutrons à l'extérieur et à l'intérieur des noyaux sont traités comme des phases distinctes, respectivement gazeuse (indice o) et liquide (indice i). La taille des noyaux est fixée par le rayon de protons R_{p} défini par

$$\frac{4}{3} \pi R_{\text{p}}^3 n_{\text{p},i} = Z. \quad (11.5)$$

Le volume nucléaire est donc donné par

$$\mathcal{V}_{\text{nuc}} = \frac{4}{3} \pi R_{\text{p}}^3. \quad (11.6)$$

Nous définissons de la même façon le rayon de neutrons par

$$\frac{4}{3} \pi (R_{\text{n}}^3 (n_{\text{n},i} - n_{\text{n},o}) + R_{\text{cell}}^3 n_{\text{n},o}) = N_{\text{cell}}, \quad (11.7)$$

où R_{cell} est le rayon de la cellule de W-S et N_{cell} le nombre de neutrons à l'intérieur. Les noyaux étant fortement enrichis en neutrons, possèdent une peau de neutrons d'épaisseur $s_{\text{n}} = R_{\text{n}} - R_{\text{p}}$. L'énergie surfacique $E_{\text{N,surf}}$ s'écrit

$$E_{\text{N,surf}} = \mathcal{A} \sigma + N_{\text{s}} \mu_{\text{n},s}, \quad (11.8)$$

avec σ le potentiel thermodynamique de surface, $\mathcal{A} = 4\pi R_p^2$ l'aire de la surface des noyaux, $\mu_{n,s}$ et N_s respectivement le potentiel chimique des neutrons et le nombre de neutrons contenus dans la peau de neutrons des noyaux. Le nombre de neutrons à l'intérieur et à l'extérieur des noyaux sont donnés par $N_i = 4/3\pi R_p^3 n_{n,i}$ et $N_o = 4/3\pi(R_{\text{cell}}^3 - R_p^3)n_{n,o}$. Le nombre de neutrons dans la peau de neutrons est égal à

$$N_s = N_{\text{cell}} - N_o - N_i = \frac{4}{3}\pi(R_n^3 - R_p^3)(n_{n,i} - n_{n,o}). \quad (11.9)$$

L'énergie coulombienne est donnée par la formule, en posant $w \equiv (R_p/R_{\text{cell}})^3$,

$$E_C = \frac{4\pi}{5}(n_{p,i}e)^2 R_p^5 f_3\{w\}, \quad f_3\{w\} = 1 - \frac{3}{2}w^{1/3} + \frac{1}{2}w. \quad (11.10)$$

La structure et la composition de l'écorce à l'équilibre à température nulle est déterminée en minimisant la densité d'énergie totale $E_{\text{cell}}/\mathcal{V}_{\text{cell}}$ pour une densité baryonique $n_b = n_n + n_p$ fixée et en imposant l'électroneutralité $n_e = n_p$.

Les paramètres du modèles de la goutte liquide compressible ont été calculés à partir d'une interaction nucléon-nucléon effective de type Skyrme. Plus précisément, la forme de l'énergie volumique $\varepsilon\{n, x\}$ et le potentiel de surface σ sont déterminés à partir de l'approximation de Thomas-Fermi étendue de la fonctionnelle de densité déduite de l'approximation Skyrme-Hartree-Fock (pour plus de détails, voir Douchin (1999)). Nous avons ainsi utilisé les expressions de la masse effective « microscopique » et du potentiel moyen de l'approximation Skyrme-Hartree-Fock dans la limite de la goutte liquide, c'est-à-dire en négligeant les termes de surface (voir équations (9.57) et (9.58) du chapitre 9). En particulier, nous avons ignoré les termes de couplage spin-orbit. Nous avons ainsi décrit les neutrons comme des particules indépendantes, obéissant à une équation de Schrödinger du type

$$-\nabla \frac{\hbar^2}{2m_n^\oplus\{\mathbf{r}\}} \cdot \nabla \varphi + U_n\{\mathbf{r}\}\varphi = \mathcal{E}\varphi, \quad (11.11)$$

avec les conditions aux limites de Bloch

$$\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}}\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}, \quad (11.12)$$

pour n'importe quel vecteur de translation \mathbf{T} du réseau.

Dans la limite de la goutte liquide, le potentiel et la masse effective de Skyrme sont constants à l'intérieur et à l'extérieur des noyaux et s'expriment sous la forme

$$m_n^\oplus\{\mathbf{r}\} = \begin{cases} m_{n,i}^\oplus & \mathbf{r} \in \text{noyau} \\ m_{n,o}^\oplus & \mathbf{r} \notin \text{noyau} \end{cases} \quad (11.13)$$

$$U_n\{\mathbf{r}\} = \begin{cases} U_{n,i}^\oplus & \mathbf{r} \in \text{noyau} \\ U_{n,o}^\oplus & \mathbf{r} \notin \text{noyau} \end{cases} \quad (11.14)$$

Ceci revient à supposer que la matière nucléaire à l'intérieur des noyaux d'une part, et le gaz de neutrons à l'extérieur d'autre part, sont homogènes. L'approximation de la goutte

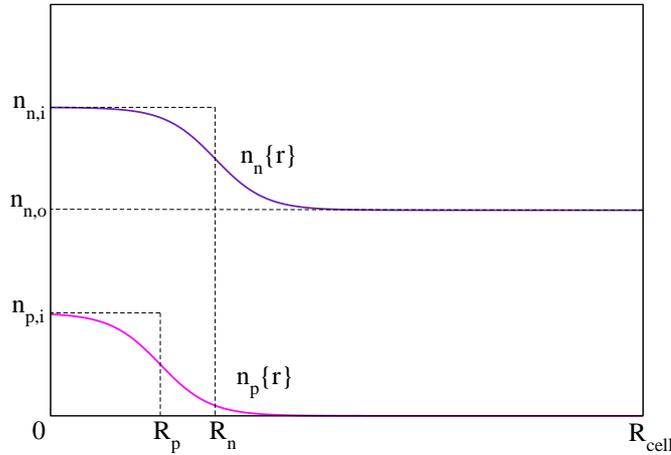


FIGURE 11.1 – Distributions schématiques de protons et de neutrons à l'intérieur de la cellule (sphère) de W-S. Les lignes en pointillés correspondent aux profils de densités dans le modèle de goutte liquide compressible.

liquide, c'est-à-dire des noyaux avec un bord net comme l'illustre la figure 11.1, n'est pas très réaliste et surestime les effets de couches, et ce d'autant plus que la densité baryonique est élevée. Néanmoins ce modèle nous permettra d'explorer qualitativement les variations de la masse effective macroscopique m_* dans les couches les moins denses de l'écorce interne. Nous avons fixé le rayon d'un noyau à R_p .

Pour chaque vecteur d'onde de Bloch \mathbf{k} , il existe un ensemble *discret* d'énergies propres \mathcal{E}_α étiquetées par un indice grec α , ordonnées telles que $\mathcal{E}_\alpha < \mathcal{E}_\beta$ si $\alpha < \beta$. Ce choix assure que chaque bande d'énergies \mathcal{E}_α comme fonction de \mathbf{k} est continue (mais les dérivées ne le sont pas nécessairement). Chaque état $\{\alpha, \mathbf{k}\}$ est de plus, doublement dégénéré ($g = 2$) pour les deux polarisations de spin. L'énergie de Fermi μ est définie par l'équation intégrale

$$n_n = \frac{2}{(2\pi)^3} \sum_\alpha \int d^3k \vartheta\{\mu - \mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\}\}, \quad (11.15)$$

où nous avons introduit la distribution de Heaviside définie par

$$\vartheta\{x\} = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0. \end{cases} \quad (11.16)$$

L'équation de Schrödinger pour un noyau sphérique isolé est soluble analytiquement. Il suffit de décomposer la fonction d'onde en harmoniques sphériques. La partie radiale est une combinaison linéaire de fonctions de Bessel sphériques. En revanche, lorsqu'on considère un ensemble de noyaux sur un réseau périodique nous devons imposer les conditions aux limites de Bloch. Malgré la simplicité du modèle, l'équation de Schrödinger doit alors être résolue numériquement.

TABLEAU 11.1 – Rayon maximal de la sphère entourant les noyaux dans la méthode des ondes planes augmentées linéarisées.

structure	R_{\max}
cubique simple	$(4\pi/3)^{1/3} R_{\text{cell}}/2$
cubique centré	$\sqrt{3}(\pi/3)^{1/3} R_{\text{cell}}/2$
cubique à faces centrées	$(2\pi/3)^{1/3} R_{\text{cell}}/\sqrt{2}$

11.1.2 Méthode de calcul

La distance très grande entre les noyaux et la forme du potentiel et de la masse effective de Skyrme conduisent naturellement à employer la méthode des ondes planes augmentées linéarisées, décrite dans la section 10.2.5 du chapitre 10, pour résoudre l'équation de Schrödinger. La linéarisation inhérente à cette méthode n'est pas très restrictive du fait que le nombre de neutrons dans une cellule n'est pas très large (contrairement aux couches plus profondes de l'écorce interne). Par ailleurs, nous avons pu vérifier que les solutions obtenues sont très peu sensibles au choix du rayon de la sphère R_s , qui est fixé dans l'intervalle

$$R_p \leq R_s \leq R_{\max}. \quad (11.17)$$

Le rayon maximal R_{\max} est déterminé par la condition que les sphères de rayon R_s qui entourent chaque noyau ne se superposent pas.

Il est préférable de choisir une valeur de R_s suffisamment grande devant le rayon R_p des noyaux afin d'éviter l'apparition de bandes fantômes, caractérisées par une très faible dépendance dans le vecteur d'onde \mathbf{k} . Plus précisément, la fonction d'onde du dernier état lié d'un noyau doit être essentiellement nulle pour le rayon R_s . Comme $R_{\max} \lesssim R_{\text{cell}}$, et $R_{\text{cell}} \gg R_p$, nous pouvons facilement satisfaire cette condition. Néanmoins, nous avons trouvé qu'en choisissant un rayon de la sphère R_s trop proche du maximum, la structure de bandes est très sensible par rapport à l'énergie de linéarisation. Il est donc préférable de fixer la rayon de la sphère à une valeur intermédiaire entre R_p et R_{\max} .

Nous avons vu que les états obtenus par la méthode des ondes planes linéarisées augmentées sont orthogonaux aux états liés des noyaux, dont la fonction d'onde est nulle sur la sphère. Or ces états sont nécessaires pour la détermination de l'énergie de Fermi. Comme ces états sont localisés autour des noyaux, nous les avons calculés en résolvant l'équation de Schrödinger pour un noyau isolé. Comme l'énergie de Fermi ne dépend que du nombre d'états liés, cette approximation est très bonne. L'équation de Schrödinger pour un seul noyau se résout aisément, étant donné que le potentiel moyen est central, en projetant la fonction d'onde sur les harmoniques sphériques. Nous pouvons alors réécrire l'équation de l'énergie de Fermi sous la forme

$$n_n = \frac{2}{(2\pi)^3} \mathcal{V}_{\text{ZB}} N_c + \frac{2}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int_{\text{ZB}} d^3k \vartheta\{\mu - \mathcal{E}_{\alpha}\{\mathbf{k}\}\}, \quad (11.18)$$

dans laquelle N_c est le nombre d'états liés (sans compter la dégénérescence de spin) et

TABLEAU 11.2 – Table de caractères du groupe O_h dans les notations de Mülliken.

	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
E_g	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
T_{1g}	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
T_{2g}	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
E_u	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
T_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
T_{2u}	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1

$\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\}$ sont les énergies propres obtenues par la méthode des ondes planes augmentées linéarisées. Nous avons calculé cette dernière intégrale par la méthode des points spéciaux.

Nous avons considéré trois structures cubiques : cubique simple, cubique centrée et cubique à faces centrées. Nous avons fixé la taille a de la cellule conventionnelle par la condition que le volume de la cellule $\mathcal{V}_{\text{cell}}$ soit égal au volume du polyèdre de W-S, respectivement a^3 , $a^3/2$ et $a^3/4$ pour un réseau cubique simple, cubique centré, cubique à faces centrées. Le groupe ponctuel du cristal est O_h , contenant 48 éléments. Par conséquent, la première zone de Brillouin peut être partitionnée en 48 domaines irréductibles, et il suffit de résoudre l'équation de Schrödinger dans un de ces domaines. La structure de l'écorce à l'équilibre est supposée être cubique centrée.

Le groupe d'espace associé à une structure cubique est symmorphique, ce qui signifie qu'il n'existe pas de translations fractionnaires. Nous avons vu précédemment dans le chapitre 7 que les dégénérescences des bandes d'énergie en un point \mathbf{k} de la première zone de Brillouin sont données par les dimensions des représentations irréductibles du groupe du vecteur \mathbf{k} . Pour un point quelconque dans la première zone de Brillouin, le groupe du vecteur \mathbf{k} correspondant se réduit simplement à un seul élément, l'identité et aucune bande n'est dégénérée en ce point. Au contraire, quelque soit le réseau cubique, le groupe du vecteur $\mathbf{k} = 0$ au centre de la zone (point Γ) contient tous les éléments du groupe ponctuel, en l'occurrence O_h . Comme le montre le tableau 11.2 (première colonne), il existe au point Γ des représentations de dimensions deux et trois. Par conséquent, des bandes en ce point sont doublement et triplement dégénérées. Or le long de la ligne Σ , le groupe du vecteur \mathbf{k} , C_{2v} , ne contient pas de représentations de dimension trois (voir tableau 11.3). Ceci implique que le long de la ligne Σ , des bandes se croisent au point Γ . Nous voyons sur cet exemple que l'existence de représentations de dimensions différentes en différents points de la première zone de Brillouin, se traduit par la présence de croisements de bandes dans le spectre d'énergie.

TABLEAU 11.3 – Table de caractères du groupe C_{2v} dans les notations de Mülliken.

	E	C_2	σ_v	σ'_v
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1

TABLEAU 11.4 – Paramètres du modèle de goutte liquide compressible d'après Douchin (1999). L'unité de longueur est le fm.

n_b	R_{cell}	R_p	R_n	$n_{n,i}$	$n_{n,o}$	$n_{p,i}$
1.845×10^{-3}	54.032	5.585	6.122	0.103	5.455×10^{-6}	5.912×10^{-2}

11.1.3 Discussion

Nous avons exploré les couches les moins profondes de l'écorce interne, dans lesquelles la plupart des neutrons sont liés aux noyaux. Les paramètres du modèle de goutte liquide, déduits par minimisation pour une densité baryonique donnée sont résumés dans le tableau 11.4. Les valeurs correspondantes du champ moyen U_n et de la masse effective m_n^\oplus sont indiqués dans le tableau 11.5. La variation avec la densité baryonique (la profondeur dans l'écorce), des paramètres du modèle de goutte liquide est relativement lente. C'est pourquoi, nous conserverons dans la suite ce même modèle pour plusieurs densités de neutrons, ceci afin d'étudier l'évolution *qualitative* de la masse effective « mésoscopique » au voisinage de l'interface entre les régions externe et interne de l'écorce.

Nous avons comparé sur la figure 11.2, la structure de bandes pour les états de neutron non liés avec celles obtenues dans l'approximation du gaz de Fermi (limite du réseau vide). Le spectre a été calculé avec la méthode des ondes planes linéarisées augmentées. La sommation sur le nombre quantique orbital a été tronquée à $l_{\text{max}} = 4$. En ce qui concerne les ondes planes, nous avons inclut toutes les composantes dont l'énergie est inférieure à $\mathcal{E}_{\text{max}} = 1$ MeV. Le rayon de la sphère a été fixé à $R_s = 20$ fm. Le spectre obtenu est très peu sensible à l'énergie de linéarisation sur large interval d'énergies considérées. Nous avons également calculé à titre de comparaison, le spectre obtenu dans l'approximation de W-S, avec la prescription de Negele & Vautherin (1973). Les niveaux obtenus dans cette approximation n'ont aucune dépendance dans le vecteur d'onde \mathbf{k} , puisque la symétrie de translation est complètement ignorée.

Nous pouvons constater que le spectre d'énergie dans la théorie des bandes est plus proche du modèle de gaz de Fermi que de celui obtenu avec l'approximation de W-S. Ceci montre que les neutrons de conduction dans l'écorce d'une étoile à neutrons sont plus ou moins libres, en dépit d'un puits de potentiel très profond au voisinage des noyaux. L'explication tient dans le fait que par le principe de Pauli, ce puits est en partie écranté par les neutrons qui sont liés aux noyaux comme nous l'avons discuté dans la section

TABLEAU 11.5 – Valeurs du champ moyen et de la masse effective de Skyrme déduits du modèle de goutte liquide de Douchin (1999).

n_b (fm^{-3})	$U_{n,i}$ (MeV)	$U_{n,o}$ (MeV)	$m_{n,i}^{\oplus}/m_n$	$m_{n,o}^{\oplus}/m_n$
1.845×10^{-3}	-64.67	-0.0014	0.66714	0.99998

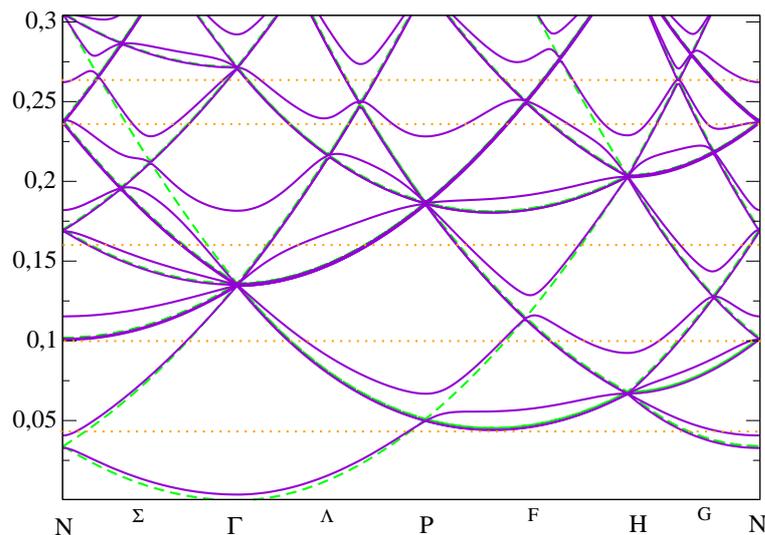


FIGURE 11.2 – Spectre d'énergie (MeV) pour les états de neutron non liés dans le modèle de Bloch (ligne continue) et dans le modèle de Fermi (ligne en tirets) le long de lignes de symétrie de la première zone de Brillouin d'un réseau cubique centré. Les lignes pointillées horizontales représentent les niveaux d'énergie dans l'approximation de W-S avec la prescription de Negele & Vautherin (1973).

10.2.2 du chapitre 10 sur les méthodes numériques.

La structure de bandes met également en évidence le phénomène de répulsion de niveaux, associé à une levée de dégénérescence. Celle-ci découle directement d'une symétrie plus basse du modèle de Bloch par rapport au modèle de Fermi. Cette levée de dégénérescence se manifeste en certains points dans l'espace \mathbf{k} au voisinage desquels des bandes, qui se croisent dans le modèle de Fermi, se repoussent dans le modèle de Bloch. Ces points sont associés à des conditions de diffraction de Bragg, pour lesquelles les interférences entre les ondes de neutrons dans le cristal sont destructives. Cependant, nous n'observons pas de régions interdites dans le spectre. Par conséquent, les neutrons de conduction présentent des propriétés qui s'apparentent plus à celles des électrons de conduction d'un métal ordinaire que des électrons dans un isolant.

Afin de tester la validité de l'approximation de goutte liquide, c'est-à-dire de noyaux avec une surface bien définie, nous avons calculé la structure de bandes pour un puits

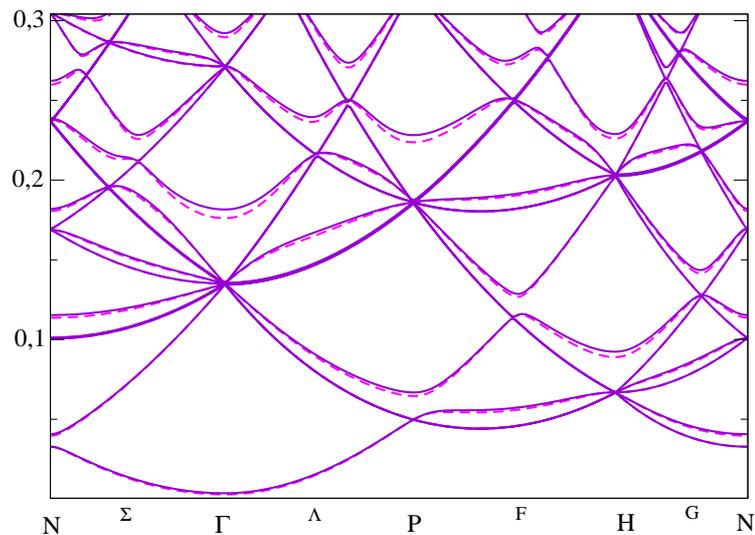


FIGURE 11.3 – Structure de bandes dans la limite de goutte liquide $\xi = 0$ (ligne continue) et avec un lissage $\xi = 2$ fm (ligne en tirets).

$U_n\{r\}$ et une masse effective de Skyrme $m_n^\oplus\{r\}$ « lissés » par une fonction de type Woods-Saxon

$$\mathcal{F}\{r\} = (1 + \exp\{4 \log 3(r - R_p)/\xi\})^{-1}, \quad (11.19)$$

dans laquelle ξ représente une distance de lissage. Le potentiel et la masse effective de Skyrme lissés sont définis respectivement par

$$U_n\{r\} \equiv U_{n,o} + (U_{n,i} - U_{n,o})\mathcal{F}\{r\}, \quad m_n^\oplus\{r\} \equiv m_{n,o}^\oplus + (m_{n,i}^\oplus - m_{n,o}^\oplus)\mathcal{F}\{r\}. \quad (11.20)$$

La structure de bandes est relativement peu affectée par le lissage. Les changements ne deviennent perceptibles que pour des paramètres $\xi \gtrsim 1 - 2$ fm, comme le montre la figure 11.3. Les fonctions de lissage pour $\xi = 0$ fm et $\xi = 2$ fm sont représentées sur la figure 11.4.

Comme cela a été discuté précédemment, nous avons défini les états de conduction par la condition $\mathcal{E} > U_{n,o}$. La densité n_f de neutrons de conduction est donc donnée par la formule

$$n_f = \frac{2}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int_{\text{ZB}} d^3k \vartheta\{\mu - \mathcal{E}_{\alpha}\{\mathbf{k}\}\} \vartheta\{\mathcal{E}_{\alpha}\{\mathbf{k}\} - U_{n,o}\}. \quad (11.21)$$

Si le gaz de neutrons de conduction était complètement libre, le coefficient de mobilité serait donné par l'expression

$$\mathcal{K}_{\text{gaz}} = n_f/m_n, \quad (11.22)$$

et la masse effective mésoscopique m_{\star} serait simplement égale à la masse ordinaire m_n . Nous voyons sur les figures 11.5 et 11.6, que ce n'est pas le cas. Le coefficient de mobilité \mathcal{K}

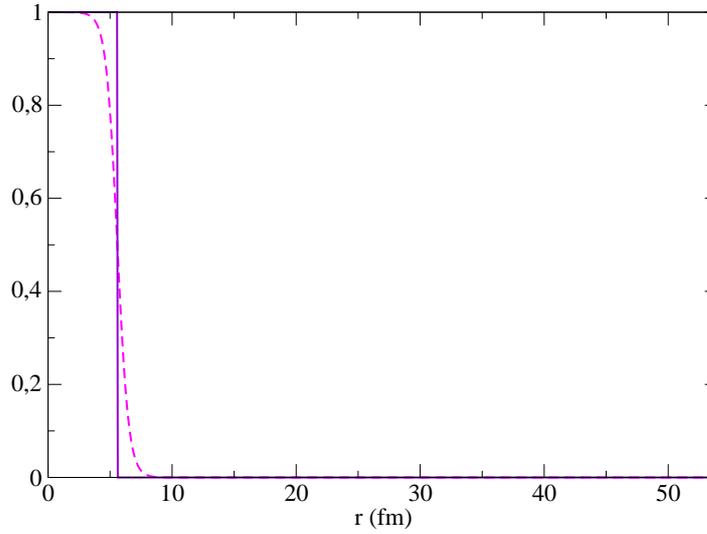


FIGURE 11.4 – Fonction de lissage $\mathcal{F}\{r\}$ à l'intérieur de la sphère de W-S, pour $\xi = 0$ (ligne continue) et pour $\xi = 2$ fm (ligne en tirets).

est fortement réduit par rapport à \mathcal{K}_{gaz} et la masse effective m_* est supérieure à la masse « nue » et de l'ordre de $m_* \sim 2m_n$, avec des fluctuations importantes. Nous pouvons également remarquer que la masse effective d'un neutron est essentiellement égale à la masse ordinaire à très basse densité ($m_* \sim m_n$). D'après la discussion précédente sur le spectre d'énergie, nous pouvons en déduire que cette renormalisation de la masse est associée à la répulsion de niveaux.

Afin de comprendre l'origine de la forte augmentation de la masse effective mésoscopique à basse densité, nous avons comparé l'aire de la surface de Fermi avec l'expression obtenue en supposant que les neutrons de conduction forment un gaz de Fermi de densité n_f et qui est donnée par la formule (la surface étant simplement une sphère)

$$S_{\text{gaz}} = 4\pi(3\pi^2 n_f)^{2/3}. \quad (11.23)$$

Comme l'illustre la figure 11.7, l'aire de la surface de Fermi est donnée à très basse densité par la formule du gaz de Fermi avec une bonne approximation. Autrement dit la surface de Fermi est essentiellement sphérique. Néanmoins à plus haute densité, l'aire de la surface de Fermi est fortement réduite par rapport à celle de la sphère. Nous devons tout d'abord souligner que le volume de Fermi \mathcal{V}_F englobé par cette surface (plus précisément le volume occupé par les particules dans l'espace \mathbf{k}) ne dépend que de la densité de neutrons de conduction

$$\mathcal{V}_F = (2\pi)^3 n_f. \quad (11.24)$$

Ce résultat remarquable est un exemple d'application du théorème de Landau-Luttinger. En particulier le volume de Fermi est complètement indépendant de la forme de la surface de Fermi.

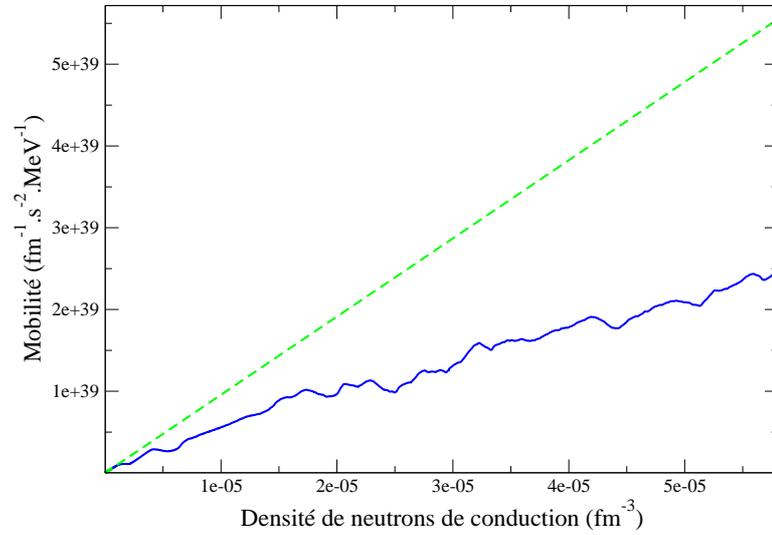


FIGURE 11.5 – Coefficient de mobilité \mathcal{K} en fonction de la densité n_f de neutrons de conduction (ligne continue), comparé à son expression dans le modèle du gaz de Fermi de densité n_f (lignes en tirets) pour une écorce de structure cubique centrée. Les intégrales de surface ont été calculées par la méthode de GR avec 1360 cellules.

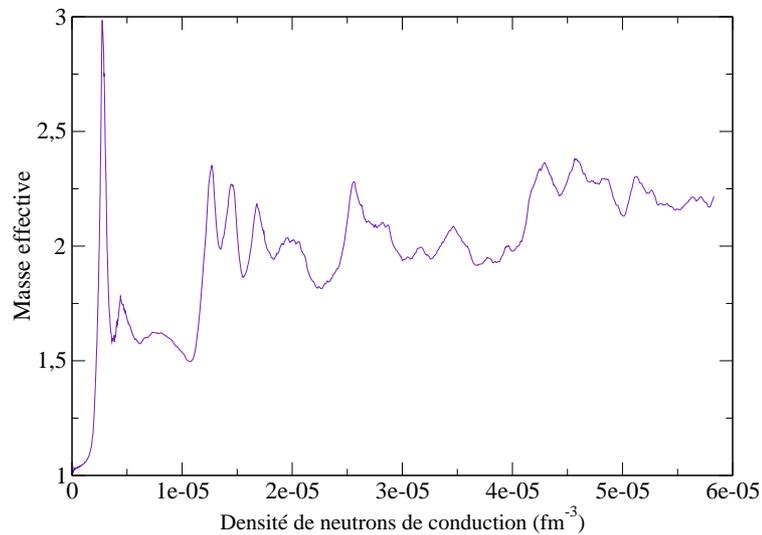


FIGURE 11.6 – Masse effective m_*/m_n en fonction de la densité n_f de neutrons de conduction, pour une écorce de structure cubique centrée. Les intégrales de surface ont été calculées par la méthode de GR avec 1360 cellules.

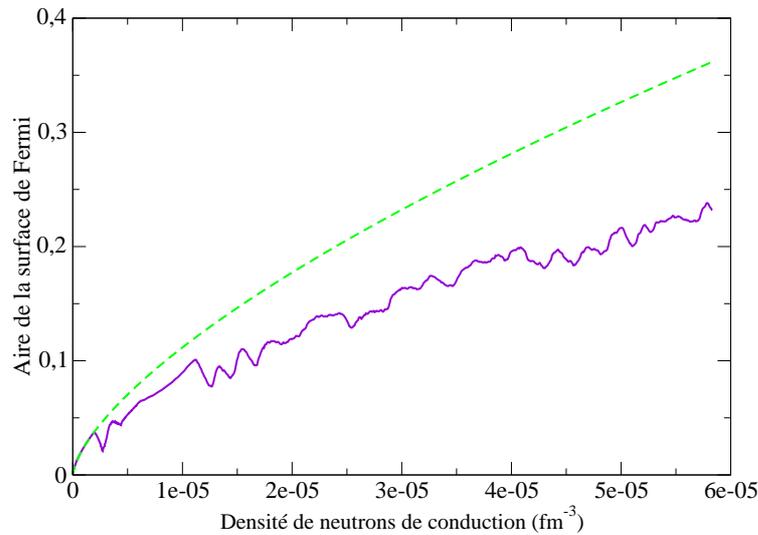


FIGURE 11.7 – Aire de la surface de Fermi S/S_{gaz} en fonction de la densité n_f de neutrons de conduction, pour une écorce de structure cubique centrée. Les intégrales de surface ont été calculées par la méthode de GR avec 1360 cellules.

Il est bien connu que parmi toutes les surfaces fermées, la sphère est celle dont l'aire est minimale pour un volume donné. Il peut donc paraître surprenant au premier abord que nous trouvions des résultats apparemment contraires. L'explication tient au fait que la surface de Fermi est déchirée. Ce dernier point mérite quelques éclaircissements. En effet nous avons vu précédemment que pour le modèle du gaz de Fermi, nous pouvons également introduire un indice de bandes en translatant les énergies dans la première zone de Brillouin d'un réseau fictif. Nous obtenons dans ce cas une surface de Fermi composée de plusieurs morceaux disjoints. Or nous savons dans ce cas que l'aire totale de tous ces morceaux doit être égale à l'aire de la sphère puisque nous n'avons physiquement rien changé au système. Inversement, nous pouvons déplacer chaque morceau de la surface de Fermi de façon à reformer une sphère. En suivant cette procédure, nous trouvons en général que la surface de Fermi obtenue est une sphère percée en certains endroits, notamment aux limites de la zone de Brillouin comme l'illustre le schéma de la figure 11.8 pour un réseau bidimensionnel carré. Lorsque le volume de Fermi est égal au volume de la première zone de Brillouin, il est alors facile d'imaginer une surface limite dont l'aire est nulle sans changer son volume comme le montre la figure 11.9!

Ces trous dans la surface de Fermi sont la manifestation de la diffraction de Bragg des neutrons de conduction par les noyaux, se traduisant par le phénomène de répulsion de niveaux (par rapport au modèle de gaz de Fermi), suite à la présence d'inhomogénéités, qui brisent partiellement la symétrie de translation (le milieu reste néanmoins invariant dans les translations du réseau cristallin correspondant). Le cas limite de surface nulle correspond à la situation où il existe une région interdite dans le spectre d'énergie, c'est-à-

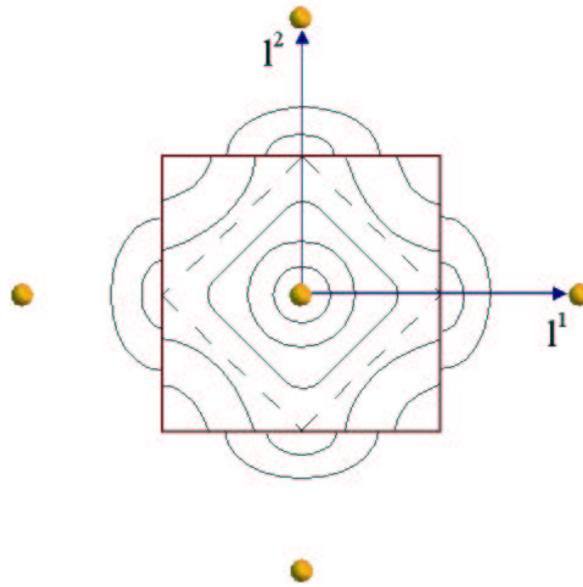


FIGURE 11.8 – Schéma illustrant les déformations et les déchirures de la surface de Fermi pour des particules dans un réseau bidimensionnel carré. Des surfaces de Fermi correspondant à différentes densités sont représentées.

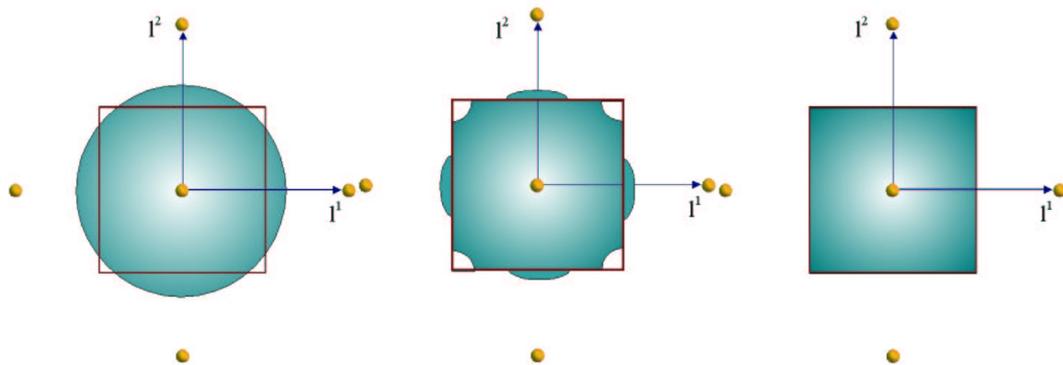


FIGURE 11.9 – Schéma illustrant comment déformer et déchirer la surface de Fermi dont le volume est égal à celui de la première zone de Brillouin d'un réseau bidimensionnel carré, pour que son aire soit nulle.

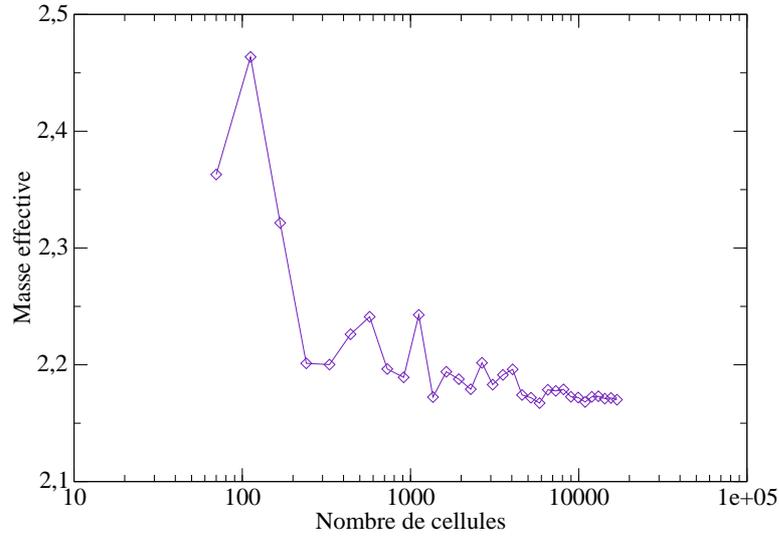


FIGURE 11.10 – Convergence de la masse effective m_*/m_n en fonction du nombre de cellules dans la méthode de GR, pour la densité totale de neutrons $n_n = 1.553 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$.

dire l'absence de solutions à l'équation de Schrödinger pour un certain interval d'énergies. C'est ce qui explique notamment l'existence, en physique du solide ordinaire, de matériaux isolants en se rappelant que la conductivité électrique est proportionnelle au scalaire de mobilité qui est lui-même nul dans cette limite $\mathcal{K} = 0$ ce qui implique que la masse effective mésoscopique est alors infinie $m_*/m_n \rightarrow +\infty$.

Les figures 11.10 et 11.11 illustrent la convergence de la méthode de GR. Nous avons calculé la masse effective et l'aire de la surface de Fermi, pour la densité de neutrons $n_n = 1.553 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$ (l'énergie de Fermi étant $\mu = 0.269 \text{ MeV}$). A cette densité, les neutrons de conduction représentent environ 32% du nombre total de neutrons.

Nous pouvons en apprendre un peu plus sur la topologie de la surface de Fermi en calculant la densité d'états. Nous avons comparé la densité d'états \mathcal{N} , définie par l'équation (7.158), avec l'expression \mathcal{N}_{gaz} obtenue en supposant un gaz de Fermi de densité n_f (surface de Fermi sphérique)

$$\mathcal{N}_{\text{gaz}}\{\mathcal{E}\} = \frac{m_n}{\hbar^2} \left(\frac{3n_f}{\pi^2} \right)^{1/3}. \quad (11.25)$$

Nous voyons sur la figure 11.12, que la surface de Fermi est essentiellement une sphère jusqu'à des énergies de Fermi de l'ordre de $\mu \simeq 0.025 \text{ MeV}$. A une énergie de 0.032 MeV, surgit un premier pic qui signale la présence d'un point d'inflexion, suivi d'un minimum local en 0.04 MeV environ. Ces deux premières singularités de Van Hove semblent correspondre à l'ouverture d'une quasi région interdite dans le spectre au point N (voir figure 11.2). Deux points anguleux du même type, respectivement un point d'inflexion en $\simeq 0.046$

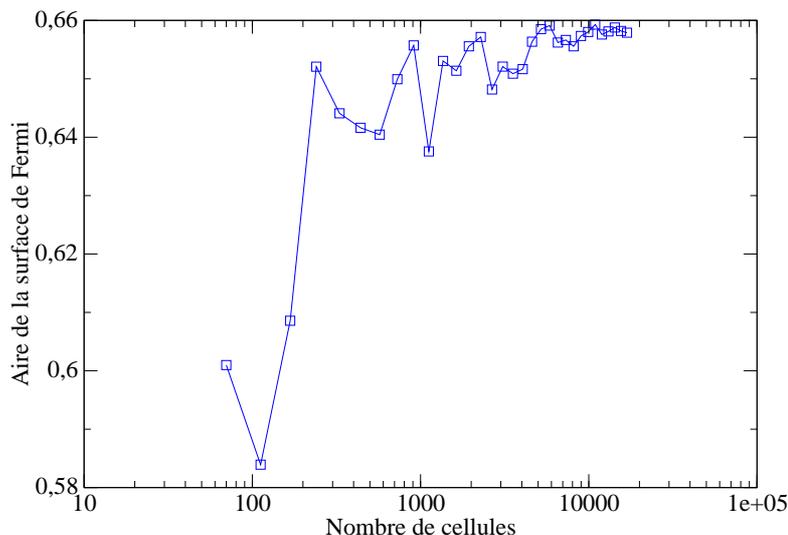


FIGURE 11.11 – Convergence de l'aire de la surface de Fermi S/S_{gaz} avec $S_{\text{gaz}} = 4\pi(3\pi^2 n_f)^{2/3}$, en fonction du nombre de cellules dans la méthode de GR, pour la densité totale de neutrons $n_n = 1.553 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$.

MeV et un minimum local en $\simeq 0.056$ MeV, probablement associés aux deux plateaux le long de la ligne de symétrie F entre les points P et H. Nous avons ensuite un autre point d'inflexion en $\simeq 0.066$ MeV, qui semble provenir du point P. Nous pouvons ainsi identifier chacune des singularités dans la densité d'états avec des régions du spectre d'énergie, associées à des répulsions de niveaux. S'il existait une région interdite dans tout le spectre, c'est-à-dire l'absence de solution dans un interval d'énergies donné, quel que soit le vecteur d'onde \mathbf{k} , la densité d'états devrait s'annuler dans ce même interval d'énergie. L'existence de régions interdites est manifeste dans le spectre issu de l'approximation de W-S (voir la figure 11.12) puisque les noyaux sont traités comme s'ils étaient isolés. En revanche dans le cas présent, un tel comportement n'est pas observé dans la densité d'états, ce qui confirme que les neutrons de conduction sont analogues aux électrons métalliques (le spectre de la figure 11.2 ne présente pas de régions interdites le long de certaines lignes de symétries dans la première zone de Brillouin donc il n'existe pas de régions interdites dans toute la zone). Néanmoins, nous pouvons noter plusieurs déplétions de la densité d'états. Nous pouvons également remarquer que le nombre de ces déplétions augmente avec la densité mais leur amplitude s'amenuise. Or nous avons vu d'après la discussion précédente que ces quasi régions interdites se traduisent pas des trous dans la surface de Fermi (la surface de Fermi disparaissant dans le cas d'une région interdite dans tout le spectre). Nous pouvons donc en conclure que la surface de Fermi est percée d'un nombre de trous qui augmente avec la densité mais dont la taille diminue.

Les fluctuations de la masse effective mésoscopique m_* avec la densité sont le reflet des effets de couche. Pour le mettre en évidence, nous avons tracé sur la figure 11.13,

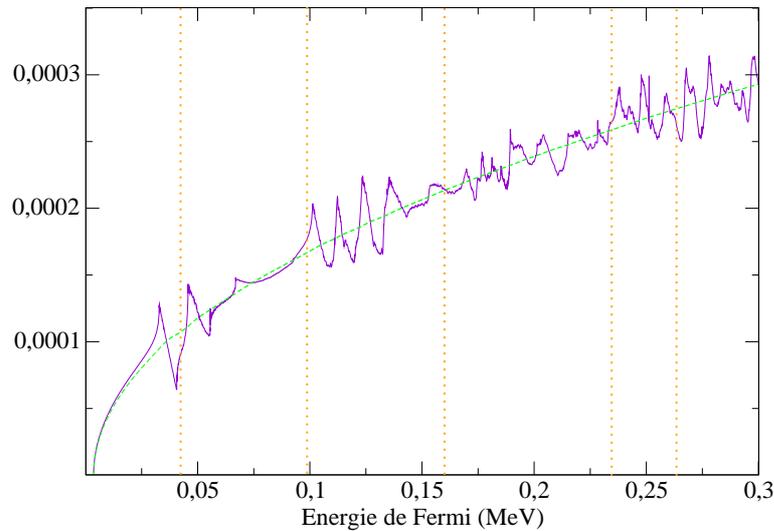


FIGURE 11.12 – Densité d'états à une particule, $\mathcal{N}\{\mathcal{E}\}$ (unités : $\text{fm}^{-3} \cdot \text{MeV}^{-1}$) en fonction de l'énergie \mathcal{E} en MeV (ligne continue). La ligne pointillée correspond à la densité d'états dans le modèle du gaz de Fermi de densité n_f . Les lignes verticales pointillées représentent la densité d'états dans l'approximation de W-S. Les intégrales de surface ont été calculées par la méthode de GR avec 5850 cellules.

la masse effective en fonction de l'énergie de Fermi. Chacun des pics est associé à une région de l'espace \mathbf{k} , pour laquelle la vitesse v^i est très petite (voir les formules (9.49) et (9.53) du chapitre 9). Or une telle situation se produit lors d'ouverture de quasi régions interdites (des trous dans la surface de Fermi). Ainsi le premier pic autour de $\mu \simeq 0.04$ MeV correspond au point N et ainsi de suite comme nous l'avons discuté dans le paragraphe précédent. Pour les mêmes raisons qui ont été évoquées en ce qui concerne la densité d'états, la masse effective m_* présente des pics de plus en plus nombreux, à mesure que l'énergie (donc la densité) augmente, mais de moins en moins importants. Ceci suggère que les variations de la masse effective m_* liées aux effets de couches s'atténuent avec la densité et ne sont donc significatives qu'à très basse densité.

Nous avons représenté sur la figure 11.14, l'effet du lissage sur la masse effective m_* . Nous voyons sur cette figure que l'approximation de goutte liquide surestime les effets de couche. Nous avons également calculé la masse effective mésoscopique pour d'autres structures cubiques : cubique simple et cubique à faces centrées. Les figures 11.15 et 11.16 montrent que *en moyenne* les masses effectives m_* dans les différentes structures sont du même ordre de grandeur, malgré des différences localement significatives. Comme les effets de couches se manifestent principalement à basse densité, nous pouvons nous attendre à ce que ces différences locales disparaissent à plus haute densité.

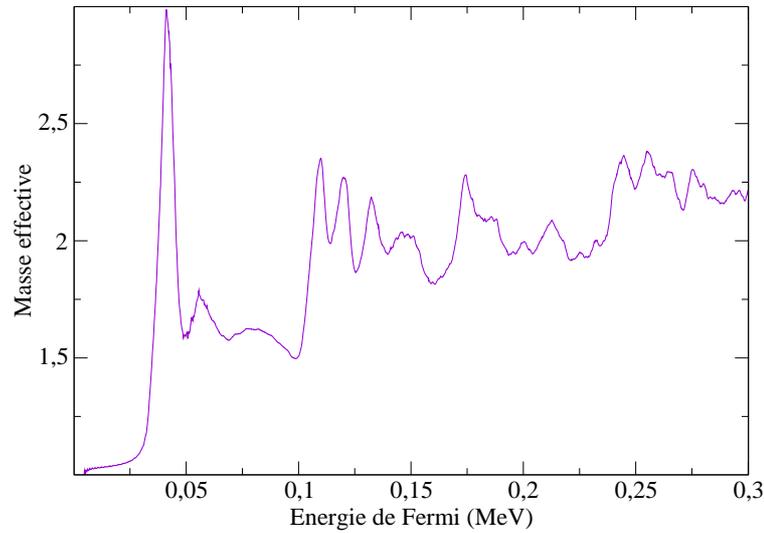


FIGURE 11.13 – Masse effective de neutron m_*/m_n en fonction de l'énergie de Fermi, pour une écorce de structure cubique centrée. Les intégrales de surface ont été calculées par la méthode de GR avec 1360 cellules.

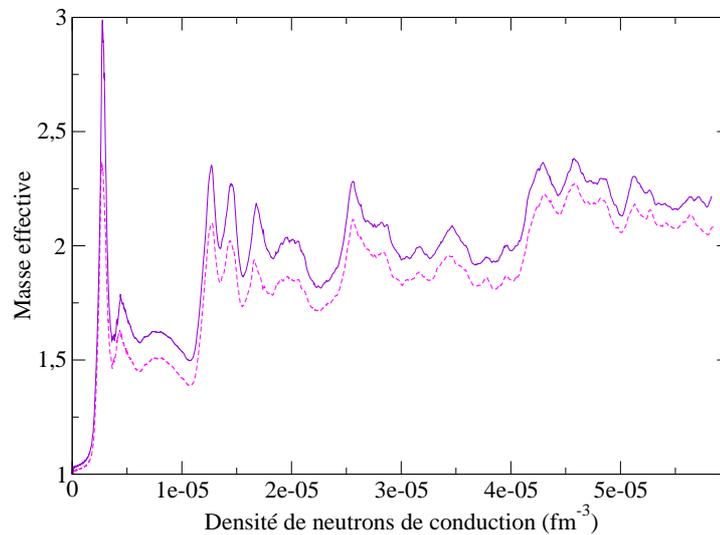


FIGURE 11.14 – Masse effective de neutron m_*/m_n en fonction de l'énergie de Fermi, pour une écorce de structure cubique centrée, sans lissage (ligne continue) et avec un lissage $\xi = 2$ fm (ligne pointillée). Les intégrales de surface ont été calculées par la méthode de GR avec 1360 cellules.

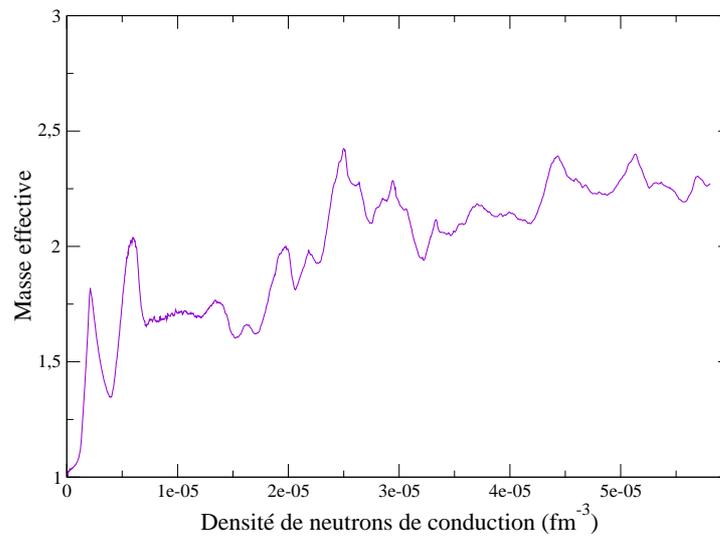


FIGURE 11.15 – Masse effective m_*/m_n en fonction de la densité n_f de neutrons de conduction, pour une écorce de structure cubique simple. Les intégrales de surface ont été calculées par la méthode de GR avec 1540 cellules.

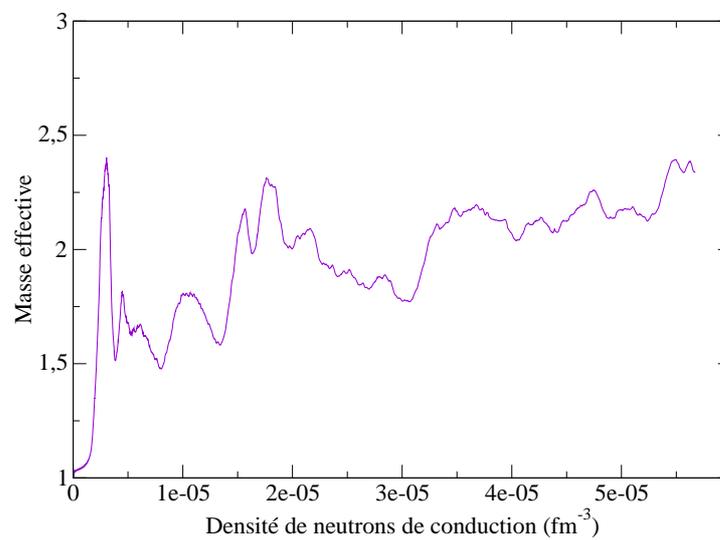


FIGURE 11.16 – Masse effective m_*/m_n en fonction de la densité n_f de neutrons de conduction, pour une écorce de structure cubique à faces centrées. Les intégrales de surface ont été calculées par la méthode de GR avec 1378 cellules.

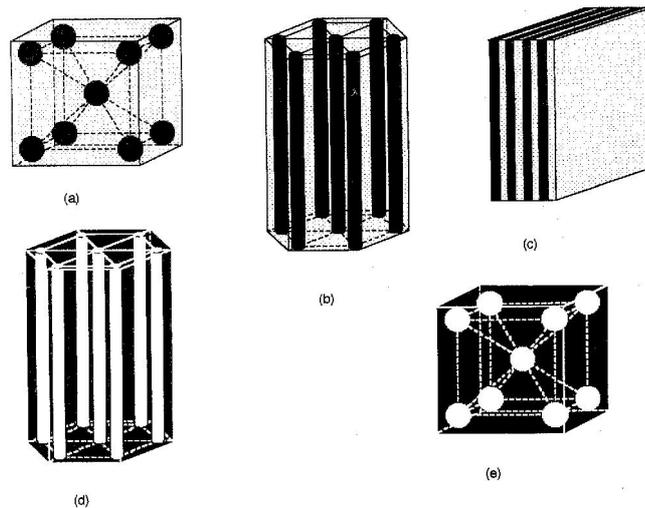


FIGURE 11.17 – Configurations nucléaires : (a) noyaux sphériques dans un réseau cubique centré, (b) « spaghetti » dans un réseau hexagonal, (c) « lasagnes », (d) « anti-spaghetti » dans un réseau hexagonal et (e) « bulles » dans un réseau cubique centré. Source : Oyamatsu (1993).

11.2 Couches profondes de l'écorce

11.2.1 Modèle

Dans les couches plus profondes de l'écorce interne, à des densités proches de la limite entre l'écorce et le manteau, les noyaux sont très proches les uns des autres et ont une surface très diffuse. Il est donc important de tenir compte des effets de surface. De plus les noyaux ne sont plus nécessairement sphériques mais peuvent être fortement déformés dans les couches les plus denses comme nous l'avons discuté au chapitre 6. Les configurations que nous avons considérées sont illustrées sur la figure 11.17.

Nous allons estimer les coefficients d'entraînement à l'aide du modèle de champ moyen proposé par Oyamatsu & Yamada (1994). Dans ce modèle, les neutrons sont décrits comme des particules indépendantes de masse m_n et soumises à un potentiel moyen central $U\{\mathbf{r}\}$ et un potentiel de couplage spin-orbit $U_{LS}\{\mathbf{r}\}$ résultant des interactions nucléon-nucléon et fonctions des densités locales de neutrons $n_n\{\mathbf{r}\}$ et de protons $n_p\{\mathbf{r}\}$. Pour les besoins de notre calcul, nous ne supposons pas comme les auteurs, que les noyaux sont isolés mais disposés sur les noeuds d'un réseau périodique. Plus précisément, nous supposons que les densités de neutrons et de protons et par suite les potentiels sont périodiques. Les états à une particule des neutrons sont donc les solutions de l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m_n}\Delta\varphi + (U + V_{LS})\varphi = \mathcal{E}\varphi, \quad (11.26)$$

avec les conditions aux limites de Bloch

$$\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}}\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}. \quad (11.27)$$

Selon la procédure décrite par les auteurs, le potentiel central est construit à partir d'une densité d'énergie nucléaire dont les paramètres ont été ajustés précédemment par Oyamatsu (1993) afin de reproduire les données expérimentales de plus d'un millier de noyaux ainsi que l'équation d'état de Friedman & Pandharipande (1981) pour la matière nucléaire symétrique et la matière pure de neutrons.

Plus précisément, le potentiel central est défini par une convolution

$$U\{\mathbf{r}\} \equiv \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\kappa}\right)^3 \int d^3r' U_0\{\mathbf{r}'\} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}{\kappa^2}\right). \quad (11.28)$$

U_0 est le potentiel moyen dans la matière nucléaire uniforme, défini par la fonctionnelle

$$U_0 \equiv \frac{\partial v\{n_n, n_p\}}{\partial n_n}, \quad (11.29)$$

$v\{n_n, n_p\}$ étant la densité d'énergie nucléaire potentielle, avec la densité baryonique $n_b \equiv n_n + n_p$ et la fraction protonique $x \equiv n_p/n_b$,

$$v\{n_n, n_p\} \equiv (1 - (1 - 2x)^2) v_s\{n_b\} + (1 - 2x)^2 v_n\{n_b\} \quad (11.30)$$

où $v_s\{n_b\}$ et $v_n\{n_b\}$ sont respectivement la densité d'énergie potentielle de la matière nucléaire symétrique et de la matière pure de neutrons, sous la forme paramétrée

$$v_s\{n_b\} \equiv a_1 n_b^2 + \frac{a_2 n_b^3}{1 + a_3 n_b}, \quad v_n\{n_b\} \equiv b_1 n_b^2 + \frac{b_2 n_b^3}{1 + b_3 n_b}. \quad (11.31)$$

Les profils de densité $n_n\{r\}$ et $n_p\{r\}$ autour d'un noyau sont paramétrés par des expressions du type

$$n_n\{r\} = \begin{cases} (n_n^{\text{in}} - n_n^{\text{out}}) \left(1 - \left(\frac{r}{R_n}\right)^{t_n}\right)^3 + n_n^{\text{out}} & r < R_n \\ n_n^{\text{out}} & r \geq R_n \end{cases} \quad (11.32)$$

et une expression analogue pour $n_p\{r\}$, r étant respectivement la distance au centre du noyau pour les configurations sphériques de noyaux, la distance à l'axe du cylindre pour la phase « spaghetti » et la distance au plan pour les structures de type « lasagnes ». Les profils de densités ont été obtenus par Oyamatsu (1993) par un calcul de type Thomas-Fermi à température nulle dans l'approximation de W-S. La cellule approchée de W-S est une sphère de volume a_{Oy}^3 pour les noyaux sphériques où a_{Oy} est définie comme une constante du réseau (cette définition est différente de celle généralement employée en physique du solide), un cylindre d'aire de base a_{Oy}^2 et de hauteur a_{Oy} pour les spaghetti et enfin un cube de côté a_{Oy} pour les lasagnes.

L'énergie E_{cell} par cellule se décompose en une somme de contributions nucléaire E_N , électronique (cinétique) E_e et coulombienne E_C :

$$E_{\text{cell}} = E_N + E_e + E_C. \quad (11.33)$$

L'énergie nucléaire est donnée dans l'approximation de Thomas-Fermi par

$$E_N = \int_{\text{cell}} d^3r \left(\varepsilon_0 \{n_n, n_p\} + \varepsilon_g \{n_n, n_p, \nabla n_n, \nabla n_p\} + m_n c^2 n_n + m_p c^2 n_p \right), \quad (11.34)$$

avec

$$\varepsilon_0 \{n_n, n_p\} = \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} \left(\frac{\hbar^2}{2m_n} n_n^{5/3} + \frac{\hbar^2}{2m_p} n_p^{5/3} \right) + v \{n_n, n_p\}, \quad (11.35)$$

$$\varepsilon_g \{n_n, n_p, \nabla n_n, \nabla n_p\} = \frac{1}{36} \left(\frac{\hbar^2}{2m_n} \frac{|\nabla n_n|^2}{n_n} + \frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{|\nabla n_p|^2}{n_p} \right) + F_0 (|\nabla(n_n + n_p)|^2). \quad (11.36)$$

Les paramètres des densités d'énergie ε_0 et ε_g ont été ajustés de façon à reproduire les propriétés des noyaux le long de la ligne de stabilité β ainsi que l'équation d'état de Friedman & Pandharipande (1981) pour la matière nucléaire symétrique et la matière pure de neutrons. L'énergie cinétique des électrons est donnée par celle d'un gaz de Fermi relativiste uniforme comme précédemment (équations (11.2) et (11.3)). Enfin, l'énergie coulombienne est exprimée sous la forme

$$E_C = \frac{1}{2} \int_{\text{cell}} e (n_p - n_e) \phi + c_1 \frac{Z e^2}{a}, \quad (11.37)$$

dans laquelle le potentiel électrostatique $\phi\{\mathbf{r}\}$ est calculé dans l'approximation de W-S.

La constante de réseau a_{Oy} et les paramètres des densités de neutrons et de protons sont obtenus en minimisant la densité d'énergie W/a_{Oy}^3 pour une valeur donnée de la densité baryonique totale n_b .

Comme les densités sont essentiellement constantes entre les noyaux, nous définissons les densités locales dans le cristal à partir des densités obtenues dans l'approximation de W-S en sommant les contributions de chaque noyau, par une transformation du type

$$\begin{aligned} &\text{cellule approchée de W-S} \mapsto \text{cristal} \\ n_n\{\mathbf{r}\} &\mapsto n_n^{\text{out}} + \sum_{\mathbf{T}} \left(n_n\{\mathbf{r} - \mathbf{T}\} - n_n^{\text{out}} \right), \end{aligned} \quad (11.38)$$

où $\mathbf{T} = \ell^a \mathbf{e}_a$ est un vecteur de translation du réseau considéré.

Puisque le potentiel $U_0\{\mathbf{r}\}$ défini avec les nouvelles densités, est périodique, il admet un développement en séries de Fourier

$$U_0\{\mathbf{r}\} = \sum_{\mathbf{K}} \tilde{U}_0\{\mathbf{K}\} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}, \quad (11.39)$$

avec $\mathbf{K} = \ell_a \mathbf{l}^a$ un vecteur du réseau réciproque et

$$\tilde{U}_0\{\mathbf{K}\} \equiv \frac{1}{V_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} d^3r U_0\{\mathbf{r}\} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}. \quad (11.40)$$

La transformation de Fourier du potentiel $U\{\mathbf{r}\}$ sont alors simplement donnés par

$$\tilde{U}\{\mathbf{K}\} \equiv \tilde{U}_0\{\mathbf{K}\} e^{-\frac{1}{4}(K\kappa)^2}, \quad (11.41)$$

$$U\{\mathbf{r}\} = \sum_{\mathbf{K}} \tilde{U}\{\mathbf{K}\} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}. \quad (11.42)$$

Ce résultat est valide pour toutes les structures (tridimensionnelles et exotiques) à condition que les vecteurs \mathbf{K} appartiennent au réseau réciproque de la structure correspondante. Nous avons choisi pour l'origine des énergies la valeur maximale du potentiel, qui est atteinte en dehors des noyaux. Le potentiel $U\{\mathbf{r}\}$ à l'intérieur d'une cellule de W-S est donc essentiellement nul pour $r \gtrsim R_n, R_p$. Nous pouvons ainsi calculer les composantes de Fourier dans la cellule approchée de W-S. Pour les noyaux sphériques, nous avons¹

$$\tilde{U}_0\{\mathbf{K}\} = \frac{4\pi}{a_{\text{Oy}}^3} \int_0^{R_{\text{WS}}} dr r^2 j_0\{Kr\} U_0\{r\}. \quad (11.43)$$

Pour les noyaux en forme de spaghetti, cette intégrale devient en utilisant le développement de Jacobi-Anger d'une onde plane en fonctions de Bessel cylindriques J_n

$$e^{iKr \cos \theta} = \sum_{n=0}^{\infty} i^n J_n\{Kr\} e^{in\theta}, \quad (11.44)$$

$$\tilde{U}_0\{\mathbf{K}\} = \frac{2\pi}{a_{\text{Oy}}^2} \int_0^{R_{\text{WS}}} dr r J_0\{Kr\} U_0\{r\}. \quad (11.45)$$

Enfin la transformée de Fourier du potentiel dans le cas des lasagnes est

$$\tilde{U}_0\{\mathbf{K}\} = \frac{2}{a_{\text{Oy}}} \int_0^{R_{\text{WS}}} dr e^{iKr} U_0\{r\}. \quad (11.46)$$

Par ailleurs, le couplage spin-orbit est exprimé sous la forme

$$V_{\text{LS}}\{\mathbf{r}\} \equiv \frac{1}{r} \left(\lambda_1 \frac{dn_b}{dr} - \lambda_2 \frac{d}{dr}(n_n - n_p) \right) \hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (11.47)$$

où $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\sigma}/2$ le moment angulaire de spin, $\hat{\sigma}$ représentant les matrices de Pauli, et $\hat{\mathbf{I}}$ est l'opérateur de moment cinétique orbital (sans dimension) défini par

$$\hat{\mathbf{I}} \equiv \frac{1}{\hbar} \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\mathbf{r} \times \nabla. \quad (11.48)$$

Les paramètres κ , λ_1 et λ_2 sont ajustés de façon à fournir la séquence correcte des états à une particule du plomb ²⁰⁸Pb. Il s'avère que le couplage spin-orbit est négligeable devant le potentiel central dans le régime de densité qui nous intéresse, du fait que les

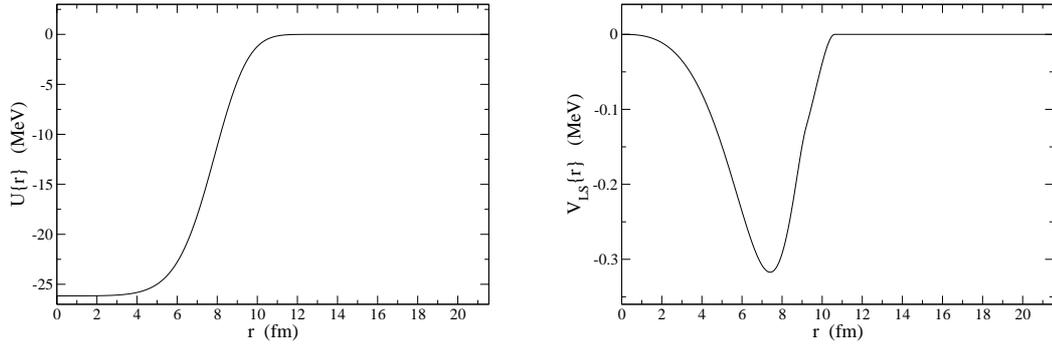


FIGURE 11.18 – Potential central (à gauche) et couplage spin-orbit (à droite) dans l'approximation de W-S pour la densité baryonique $n_b = 0.03 \text{ fm}^{-3}$ dans le modèle I de Oyamatsu.

TABLEAU 11.6 – Correspondance entre la constante de réseau a et la constante définie a_{Oy} définie par $\mathcal{V}_{\text{cell}} = a_{\text{Oy}}^3$.

structure	constante de réseau
cubique simple	$a = a_{\text{Oy}}$
cubique centré	$a = 2^{1/3} a_{\text{Oy}}$
cubique à faces centrées	$a = 4^{1/3} a_{\text{Oy}}$

noyaux ont une surface très diffuse contrairement aux noyaux ordinaires. Ceci est illustré sur la figure 11.18. Nous ignorerons donc ce terme dans la suite.

La densité totale de neutrons est définie par des expressions du type

$$n_n = \begin{cases} \frac{4\pi}{a_{\text{Oy}}^3} \int_0^{R_{\text{WS}}} dr r^2 n_n\{r\}, & \frac{4}{3}\pi R_{\text{WS}}^3 \equiv a_{\text{Oy}}^3 \quad \text{spheres} \\ \frac{2\pi}{a_{\text{Oy}}^2} \int_0^{R_{\text{WS}}} dr r n_n\{r\}, & \pi R_{\text{WS}}^2 \equiv a_{\text{Oy}}^2 \quad \text{spaghetti} \\ \frac{2}{a_{\text{Oy}}} \int_0^{R_{\text{WS}}} dr n_n\{r\}, & R_{\text{WS}} \equiv a_{\text{Oy}}/2 \quad \text{lasagnes} \end{cases} \quad (11.49)$$

11.2.2 Noyaux sphériques

Pour les noyaux sphériques, nous avons considéré les trois types de structures cubiques : cubique simple, cubique à faces centrées et cubique centré à titre de comparaison. Cette dernière structure est supposée être la configuration d'équilibre. La constante de réseau a définie en physique du solide comme la longueur de l'arête du cube conventionel, diffère de la constante introduite par Oyamatsu a_{Oy} . La correspondance est exprimée dans le tableau 11.6.

¹en se souvenant que $\int dx \exp\{iKx - K^2/\kappa^2\} = \sqrt{\pi}\kappa \exp\{-K^2\kappa^2/4\}$ et $\int dx \exp\{-K^2/\kappa^2\} = \sqrt{\pi}\kappa$

Contrairement à l'approximation de W-S, l'équation de Schrödinger est tridimensionnelle. Par conséquent, le calcul des états propres et des énergies propres pour *chaque* vecteur d'onde de Bloch dans la première zone de Brillouin est numériquement beaucoup plus lourd, notamment dans la détermination de l'énergie de Fermi qui nécessite le calcul de tous les états occupés (plusieurs centaines de bandes) contrairement à la masse effective mésoscopique qui ne dépend que des états à une particule sur la surface de Fermi. Néanmoins, nous pouvons obtenir assez facilement une estimation de l'énergie de Fermi avec une erreur de quelques pourcents.

Tout d'abord, parmi tous les états occupés, il faut distinguer entre les états de coeur dont la fonction d'onde est localisée dans le voisinage des noyaux et les états de conduction dont la fonction d'onde est complètement délocalisée. Le calcul des états de coeur revient simplement à rechercher les états liés d'un seul noyau isolé. Et comme le potentiel autour d'un noyau est à symétrie sphérique, il suffit de résoudre une équation de Schrödinger à une dimension selon la coordonnée radiale. Une fois que le nombre d'états de coeur a été obtenu, disons N_c , nous pouvons réécrire l'équation pour l'énergie de Fermi sous la forme

$$n_n = \frac{2}{(2\pi)^3} \mathcal{V}_{\text{zB}} N_c + \frac{2}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int_{\text{zB}} d^3k \vartheta\{\mu - \mathcal{E}_{\alpha}\{\mathbf{k}\}\} \vartheta\{\mathcal{E}_{\alpha}\{\mathbf{k}\} - \mathcal{E}_c\}, \quad (11.50)$$

dans laquelle \mathcal{E}_c est l'énergie de l'état de coeur le moins lié au noyau. Par ailleurs, la seconde intégrale ne dépend du covecteur \mathbf{k} qu'à travers l'énergie dans la distribution de Heaviside. Autrement dit, la détermination de l'énergie de Fermi est simplement une procédure de comptage des états. Par conséquent, nous pouvons nous attendre à ce que l'intégrale ne soit pas sensible aux détails de la structure de bandes, en particulier lorsque le nombre de bandes est très grand. Ceci suggère de calculer l'intégrale en utilisant l'expression du gaz de Fermi pour l'énergie $\mathcal{E}\{\mathbf{k}\}$. Nous pouvons ainsi en déduire une estimation de l'énergie de Fermi donnée par

$$\mu \simeq \mathcal{E}_c + \frac{\hbar^2}{2m_n} \left((n_n - n_c) 3\pi^2 \right)^{2/3}, \quad (11.51)$$

dans laquelle nous avons $n_c = 2N_c/\mathcal{V}_{\text{cell}}$.

Par exemple, pour la densité baryonique $n_b = 0.03 \text{ fm}^{-3}$, nous avons trouvé pour les états de coeur : trois états de type s ($l=0$), deux états p ($l=1$), deux états d ($l=2$), un état f ($l=3$) et un état g ($l=4$). Le nombre total d'états de coeur est donc égal à

$$N_c = \sum_{l=0}^4 \sum_{m=-l}^l 1 = \sum_{l=0}^4 (2l+1) = 35. \quad (11.52)$$

L'énergie de Fermi est alors approximativement égale à $\mu \simeq 18.02 \text{ MeV}$. Cette valeur est environ 5% plus élevée que celle obtenue en intégrant par la méthode des points spéciaux, qui est $\mu = 17.16 \text{ MeV}$. Nous avons trouvé une valeur essentiellement identique pour l'énergie de Fermi dans les trois structures cubiques. Ceci est dû au fait que l'énergie de Fermi dépend seulement du nombre de bandes dans une gamme d'énergie donnée et non pas de la forme précise de la relation de dispersion $\mathcal{E}_{\alpha}\{\mathbf{k}\}$.



FIGURE 11.19 – Première zone de Brillouin d'une chaîne linéaire avec les notations conventionnelles pour les points et lignes de symétrie.

11.2.3 Configurations de type lasagnes

Les noyaux sont constitués de plans parallèles d'extension infinie et distants de a le long de l'axe de coordonnée z . Ce type structure, a priori très académique, est pourtant très étudiée tant théoriquement qu'expérimentalement dans le domaine des cristaux photoniques où elle est connue sous le nom de miroir de Bragg.

Comme le milieu est invariant par translation dans un plan parallèle aux noyaux, la fonction d'onde à une particule peut s'écrire sous la forme

$$\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} = \phi_{k_z}\{z\}e^{i(k_x x + k_y y)}. \quad (11.53)$$

La fonction d'onde ϕ_{k_z} satisfait l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m_n} \frac{d^2 \phi_{k_z}}{dz^2} + U\{z\} \phi_{k_z}\{z\} = \varepsilon\{k_z\} \phi_{k_z}\{z\}, \quad (11.54)$$

avec les conditions aux limites

$$\phi_{k_z}\{z + a\} = e^{i k_z a} \phi_{k_z}\{z\}. \quad (11.55)$$

Nous avons négligé le potentiel spin-orbit, comme le suggère Oyamatsu & Yamada (1994).

La première zone de Brillouin, représentée sur la figure 11.19, est formée de l'ensemble des vecteurs d'onde \mathbf{k} tels

$$-\frac{\pi}{a} < k_z \leq \frac{\pi}{a}. \quad (11.56)$$

Dans ce cas particulier, la zone de Brillouin a une extension infinie dans le plan $\{k_x, k_y\}$ du fait de l'invariance par translation. Pour chaque composante k_z du vecteur d'onde de Bloch, il existe un ensemble discret d'énergies propres étiquetées par un indice grec α , ordonnées telles que $\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \dots$. L'énergie à une particule est donc donnée par la formule

$$\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\} = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_n} + \varepsilon_\alpha\{k_z\}. \quad (11.57)$$

Nous voyons ainsi que les composantes de la vitesse de groupe dans un plan perpendiculaire à l'axe de coordonnée k_z sont simplement celles d'un gaz de neutrons sans interaction

$$v_x \equiv \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_x} = \frac{\hbar k_x}{m_n}, \quad v_y \equiv \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_y} = \frac{\hbar k_y}{m_n}. \quad (11.58)$$

La composante v_z est donnée par la formule

$$v_z \equiv \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_z} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_z}. \quad (11.59)$$

Du fait de la symétrie $\varepsilon\{k_z\} = \varepsilon\{-k_z\}$ et de la périodicité $\varepsilon\{k_z + 2\pi/a\} = \varepsilon\{k_z\}$, la composante v_z de la vitesse de groupe s'annule sur les bords de la première zone de Brillouin, au point X en $k_z = \pm\pi/a$. Mathématiquement, il se pourrait également que v_z soit discontinue. Néanmoins, nous pouvons écarter cette éventualité pour des raisons physiques puisque les bords de la zone de Brillouin correspondent aux plans de diffraction de Bragg. Des discontinuités apparaissent dans la limite du réseau vide de Shockley, pour laquelle les zones de Brillouin sont introduites de manière artificielle.

Le groupe ponctuel du cristal de lasagnes est très simple puisqu'il ne contient que deux éléments : l'identité et l'inversion spatiale. C'est le groupe C_i . Dans ce cas, le domaine irréductible est simplement une moitié de la première zone de Brillouin, par exemple $k_z > 0$. Les dégénérescences possibles des bandes ε_α (sans compter la double dégénérescence de spin) sont associées aux dimensions des représentations irréductibles d'un sous groupe du groupe ponctuel, le groupe du vecteur k_z . Ce groupe se réduit seulement à l'identité pour un point Δ quelconque et coïncide avec C_i pour les points Γ et X . Le groupe C_i contient deux représentations irréductibles¹ : les représentations paires et impaires par rapport à l'inversion. Dans tous les cas, les représentations irréductibles du groupe de k_z sont unidimensionnelles. Autrement dit, les bandes ε_α ne peuvent donc pas se croiser.

Supposons que l'énergie $\varepsilon\{k_z\}$ présente un extremum en un point $k_z = k_0$ dans la zone de Brillouin, autrement dit nous avons

$$\left. \frac{d\varepsilon}{dk_z} \right|_{k_0} = 0, \quad (11.60)$$

donc au premier ordre en δk_z , nous pouvons écrire $\varepsilon\{k_0 + \delta k_z\} = \varepsilon\{k_0 - \delta k_z\}$. De plus, par la symétrie de renversement du temps, nous avons (toujours au premier ordre)

$$\varepsilon\{k_0 + \delta k_z\} = \varepsilon\{k_0 - \delta k_z\} = \varepsilon\{-k_0 - \delta k_z\} = \varepsilon\{-k_0 + \delta k_z\}. \quad (11.61)$$

Cela signifie qu'il existe quatre solutions de l'équation de Schrödinger pour la même énergie. Or l'équation de Schrödinger est une équation différentielle ordinaire du deuxième ordre et n'admet donc que deux solutions indépendantes pour une énergie donnée. Par conséquent, il ne peut exister de maximum ou de minimum de l'énergie à l'intérieur de la zone de Brillouin. Nous avons ainsi montré que les bandes d'énergie à une dimension varient de façon monotone dans la première zone de Brillouin. Le cas unidimensionnel est donc très particulier. Remarquons que le raisonnement que nous avons suivi n'exclut pas des extremae sur les bords de zone puisque dans ce cas, par périodicité nous pouvons éliminer deux des quatre solutions.

L'équation intégrale de l'énergie de Fermi se simplifie en

$$n_n = \frac{2}{(2\pi)^3} \sum_\alpha \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \pi f_\alpha\{k_z\}^2 \vartheta\{\mu - \varepsilon_\alpha\} dk_z, \quad (11.62)$$

¹Le nombre de représentations irréductibles est égal au nombre de classes, or le groupe C_i est abélien d'ordre deux et possède donc deux classes d'équivalence qui coïncident avec les éléments du groupe C_i

TABLEAU 11.7 – Table de caractères du groupe C_i dans les notations de Mülliken.

	E	i
A_g	1	1
A_u	1	-1

avec

$$f_\alpha\{k_z\} \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_n(\mu - \varepsilon_\alpha\{k_z\})}. \quad (11.63)$$

La surface de Fermi est l'ensemble des points dans la zone de Brillouin tels que

$$\mathcal{E}_\alpha\{\mathbf{k}\} = \mu. \quad (11.64)$$

La surface de Fermi est donc formée d'autant de morceaux que de bandes au niveau de Fermi. Par le jeu des symétries, la surface de Fermi est invariante par rotation autour de l'axe de coordonnée k_z et par réflexion par rapport au plan $k_z = 0$. Pour chaque morceau associé à une bande α , en supposant que nous disposons d'un système de coordonnées $\{\tilde{k}_I\}$ ($I = 1, 2$) l'élément de surface infinitésimal est alors donné par

$$dS_F = \sqrt{\tilde{\gamma}} d\tilde{k}_1 d\tilde{k}_2, \quad (11.65)$$

où $\tilde{\gamma}$ est le déterminant de la métrique induite sur la surface

$$\tilde{\gamma}_{IJ} = \frac{\partial k_i}{\partial \tilde{k}_I} \frac{\partial k_j}{\partial \tilde{k}_J} \gamma_{ij}, \quad (11.66)$$

γ_{ij} étant la métrique spatiale associée aux coordonnées $\{k_i\}$ ($i = 1, 2, 3$). Dans le cas présent, la surface de Fermi peut être paramétrée dans les coordonnées cartésiennes $\{k_x, k_y, k_z\}$ par la coordonnée $\tilde{k}_1 = k_z$ et l'angle polaire $\tilde{k}_2 = \theta$ autour de l'axe k_z

$$\{k_x = f_\alpha\{k_z\} \cos \theta, k_y = f_\alpha\{k_z\} \sin \theta, k_z\}. \quad (11.67)$$

L'élément de surface infinitésimal s'exprime donc comme

$$dS_F^{(\alpha)} = f_\alpha\{k_z\} \sqrt{1 + \left(\frac{df_\alpha}{dk_z}\right)^2} \vartheta\{\mu - \varepsilon_\alpha\} dk_z d\theta. \quad (11.68)$$

En remarquant que

$$v \equiv \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} = \frac{\hbar}{m_n} f_\alpha\{k_z\} \sqrt{1 + \left(\frac{df_\alpha}{dk_z}\right)^2}, \quad (11.69)$$

les composantes $\mathcal{K}^{\parallel} = \mathcal{K}^{xx} = \mathcal{K}^{yy}$ du tenseur de mobilité dans un plan parallèle aux lasagnes, coïncident avec celles d'un gaz de neutrons uniforme sans interaction de même densité n_n

$$\mathcal{K}^{\parallel} = \frac{n_n}{m_n}. \quad (11.70)$$

Les composantes \mathcal{K}^\perp transverses en revanche sont a priori différentes de \mathcal{K}_\parallel et sont données par

$$\mathcal{K}^\perp = \mathcal{K}^{zz} = \frac{2}{(2\pi^3)\hbar} \sum_\alpha \int \frac{(v^z)^2}{v} dS_F^{(\alpha)} = \frac{m_n}{\pi^2 \hbar^4} \sum_\alpha \int_0^{\pi/a} \left(\frac{d\varepsilon_\alpha}{dk_z} \right)^2 \vartheta\{\mu - \varepsilon_\alpha\} dk_z. \quad (11.71)$$

Cette dernière expression montre d'ailleurs que les états de coeur des noyaux pour lesquels la vitesse v_z est essentiellement nulle, ne contribuent pas à \mathcal{K}^\perp . Il est à noter que les états de coeur ne sont pas strictement associés à des états liés puisque les neutrons ne sont pas confinés dans les plans parallèles aux noyaux ($v_x, v_y \gg v_z$). La configuration de type lasagnes se rapproche des cristaux liquides. Comme une telle structure est fortement anisotrope, il est judicieux de distinguer une masse effective mésoscopique transverse m_\star^\perp d'une masse effective mésoscopique longitudinale m_\star^\parallel définies respectivement par

$$m_\star^\perp \equiv \frac{n_f}{\mathcal{K}^\perp}, \quad m_\star^\parallel \equiv \frac{n_n}{\mathcal{K}^\parallel}. \quad (11.72)$$

La densité n_f d'états de conduction est définie par la densité d'états à une particule d'énergie positive $\mathcal{E}_\alpha > 0$

$$n_f = \frac{2}{(2\pi)^3} \sum_\alpha \int d^3k \vartheta\{\mu - \mathcal{E}_\alpha\} \vartheta\{\mathcal{E}_\alpha\}, \quad (11.73)$$

ce qui peut s'exprimer sous la forme

$$n_f = n_n + \frac{2}{(2\pi)^3} \sum_\alpha \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \pi \frac{2m_n \varepsilon_\alpha}{\hbar^2} \vartheta\{\mu - \varepsilon_\alpha\} \vartheta\{-\varepsilon_\alpha\} dk_z, \quad (11.74)$$

le deuxième terme représentant l'opposé de la densité d'états de coeur. En ce qui concerne la masse effective longitudinale, il est plus naturel d'utiliser la densité totale de neutrons, puisque comme nous l'avons déjà discuté, les neutrons sont tous libres de se propager dans les plans parallèles aux lasagnes.

11.2.4 Configurations de type spaghetti

Dans la phase spaghetti, les noyaux sont formés de cylindres parallèles infiniment longs, disposés sur un réseau périodique à deux dimensions (nous avons déjà rencontré une structure analogue avec le cristal phononique de la figure 7.3). Nous avons considéré deux types de structures : un réseau carré et un réseau hexagonal (ce dernier est le seul qui a été étudié par Oyamatsu). La fonction d'onde d'un neutron se factorise sous la forme, en supposant que les cylindres sont dirigés le long de l'axe de coordonnée z

$$\phi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} = \phi_{k_x, k_y}\{x, y\} e^{i k_z z}. \quad (11.75)$$

La fonction d'onde $\phi_{k_x, k_y}\{x, y\}$ obéit à l'équation de Schrödinger

$$\frac{-\hbar^2}{2m_n} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \phi_{k_x, k_y}\{x, y\} + U\{x, y\} \phi_{k_x, k_y}\{x, y\} = \varepsilon\{k_x, k_y\} \phi_{k_x, k_y}\{x, y\}. \quad (11.76)$$

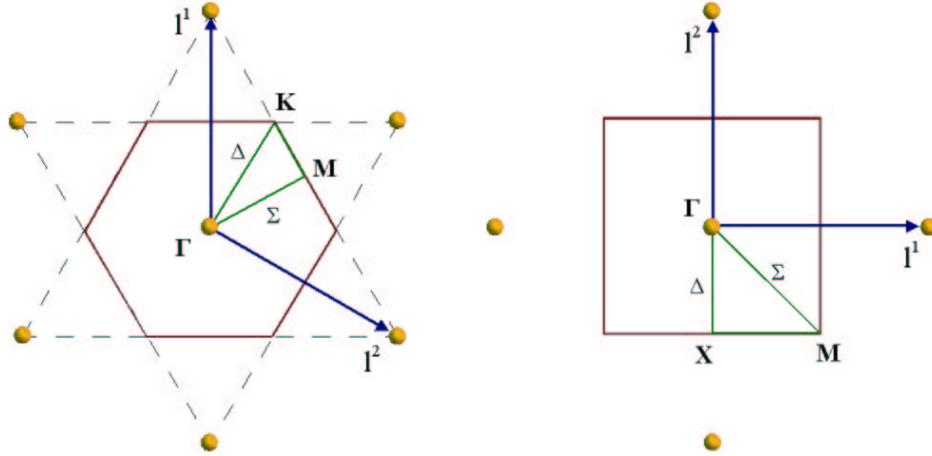


FIGURE 11.20 – Première zone de Brillouin du réseau hexagonal (figure de gauche) et du réseau carré (figure de droite) avec les notations conventionnelles pour les points et lignes de symétrie. Le triangle représente un domaine irréductible.

L'énergie d'un état $\phi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}$ est alors la somme

$$\mathcal{E}_{\alpha}\{\mathbf{k}\} = \varepsilon_{\alpha}\{k_x, k_y\} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_n}. \quad (11.77)$$

La densité totale de neutrons est liée à l'énergie de Fermi μ par la relation intégrale

$$n_n = \frac{2}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int d^3k \vartheta\left\{\mu - \varepsilon_{\alpha} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_n}\right\}, \quad (11.78)$$

qui devient

$$n_n = \frac{4}{(2\pi)^3 \hbar} \sum_{\alpha} \int_{\text{ZB}} \sqrt{2m_n(\mu - \varepsilon_{\alpha})} \vartheta\{\mu - \varepsilon_{\alpha}\} dk_x dk_y, \quad (11.79)$$

dans laquelle l'intégration porte sur la première zone de Brillouin du réseau bidimensionnel, notée ZB et illustrée sur la figure 11.20 (un facteur 2 supplémentaire résulte de la restriction $k_z > 0$).

La surface de Fermi est déterminée en coordonnées cartésiennes par $\{k_x, k_y, f_{\alpha}^{(2)}\{k_x, k_y\}\}$ avec

$$f_{\alpha}^{(2)}\{k_x, k_y\} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_n(\mu - \varepsilon_{\alpha}\{k_x, k_y\})}. \quad (11.80)$$

En utilisant les coordonnées $\tilde{k}_1 = k_x$ et $\tilde{k}_2 = k_y$, l'élément de surface infinitésimal est donné par

$$dS_{\text{F}}^{(\alpha)} = \sqrt{1 + \left(\frac{\partial f_{\alpha}^{(2)}}{\partial k_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial f_{\alpha}^{(2)}}{\partial k_y}\right)^2} \vartheta\{\mu - \varepsilon_{\alpha}\} dk_x dk_y. \quad (11.81)$$

Nous pouvons alors vérifier directement que la composante \mathcal{K}^{\parallel} du tenseur de mobilité le long des noyaux cylindriques est simplement égale à celle d'un gaz de Fermi de densité n_n

$$\mathcal{K}^{\parallel} = \mathcal{K}^{zz} = \frac{n_n}{m_n}. \quad (11.82)$$

Nous pouvons donc définir comme précédemment la masse effective mésoscopique longitudinale, le long des noyaux par

$$m_{\star}^{\parallel} \equiv \frac{n_n}{\mathcal{K}^{\parallel}} = m_n. \quad (11.83)$$

Les autres composantes transverses sont

$$\mathcal{K}^{xx} = 2\sqrt{\frac{m_n}{2}} \frac{2}{(2\pi)^3 \hbar^3} \sum_{\alpha} \int_{\text{ZB}} \frac{dk_x dk_y}{\sqrt{\mu - \varepsilon_{\alpha}}} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\alpha}}{\partial k_x} \right)^2 \vartheta\{\mu - \varepsilon_{\alpha}\}, \quad (11.84)$$

et de manière analogue pour \mathcal{K}^{yy} . Nous définissons la masse effective mésoscopique transverse par

$$m_{\star}^{\perp} \equiv \frac{n_f}{\mathcal{K}^{\perp}}, \quad (11.85)$$

avec

$$\mathcal{K}^{\perp} \equiv \frac{1}{2}(\mathcal{K}^{xx} + \mathcal{K}^{yy}), \quad (11.86)$$

et la densité d'états de conduction

$$n_f = n_n - \frac{4}{(2\pi)^3 \hbar} \sum_{\alpha} \int_{\text{ZB}} \sqrt{-2m_n \varepsilon_{\alpha}} \vartheta\{\mu - \varepsilon_{\alpha}\} \vartheta\{-\varepsilon_{\alpha}\} dk_x dk_y. \quad (11.87)$$

Nous avons considéré deux types de structures périodiques : un réseau carré et un réseau hexagonal. Le groupe ponctuel du réseau hexagonal est C_{6v} contenant 12 éléments. Par conséquent, la zone de Brillouin est partitionnée en autant de domaines irréductibles. L'intégrale dans la zone de Brillouin d'une fonction possédant la symétrie de ce groupe se réduit ainsi à 1/12 de toute la zone (voir figure 11.20). Il est à remarquer que la constante de réseau a , définie comme la plus courte distance entre deux noeuds, est différente de la constante introduite par Oyamatsu (1993)

$$a = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{3}}} a_{\text{Oy}}. \quad (11.88)$$

Puisque le groupe ponctuel du réseau carré, C_{4v} , est d'ordre 8, le domaine irréductible représente 1/8 de la première zone de Brillouin (voir figure 11.20). Dans ce cas la constante de réseau $a = a_{\text{Oy}}$. Pour ces deux types de structures, les dégénérescences de bandes (induites par la symétrie du groupe d'espace) en un même point de la zone de Brillouin, sont au plus doubles. Par conséquent, il ne peut y avoir plus de deux bandes qui se rejoignent en un même point.

11.2.5 Méthode de calcul

Comme les variations spatiales des densités sont assez faibles, nous avons résolu l'équation de Schrödinger par la méthode des ondes planes. Les méthodes des ondes planes orthogonales et des ondes planes augmentées s'avèrent numériquement plus lentes, ce qui

TABLEAU 11.8 – Table de caractères du groupe C_{4v} dans les notations de Mülliken.

	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	1
E	2	0	-2	0	0

TABLEAU 11.9 – Table de caractères du groupe C_{6v} dans les notations de Mülliken

	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	-1	1
E_1	2	1	-1	-2	0	0
E_2	2	-1	-1	2	0	0

peut paraître surprenant en premier abord. Premièrement, dans les couches profondes la densité de neutrons est très grande. En particulier, la cellule de W-S contient plusieurs milliers de neutrons correspondant à plusieurs centaines de bandes d'énergies occupées. Le calcul des états propres du système requiert alors un grand nombre de fonctions d'essai de telle sorte que des singularités apparaissent dans les matrices de recouvrement (valeurs propres nulles), traduisant des dépendances linéaires. D'autre part, le temps de calcul des éléments de matrice est du même ordre de grandeur que le temps de diagonalisation contrairement à la méthode des ondes planes. Ensuite la méthode des ondes planes augmentées linéarisées nécessite de considérer plusieurs fenêtre d'énergies ce qui engendre des problèmes de raccord. Les résultats sont représentées sur les figures 11.21 et 11.22. Nous avons également représenté sur les figures 11.23 et 11.24, la convergence du calcul des masses effectives mésoscopiques en fonction du nombre de cellules cubiques dans la méthode de GR.

11.2.6 Discussion

Dans les phases exotiques, la trace du tenseur de mobilité est bornée inférieurement : dans la configuration en noyaux plans, $\mathcal{K} \geq 2\mathcal{K}_{\text{gaz}}/3$ et dans la configuration en noyaux cylindriques, $\mathcal{K} \geq \mathcal{K}_{\text{gaz}}/3$. Au contraire dans un cristal tridimensionnel, la trace du tenseur de mobilité peut éventuellement s'annuler, lorsque les états au niveau de Fermi sont liés. Les masses effectives mésoscopiques peuvent alors prendre de très grandes valeurs. Cette différence provient du fait que dans les phases lasagnes et spaghetti, les neutrons sont libres de se déplacer respectivement dans deux dimensions et une dimension. C'est pour

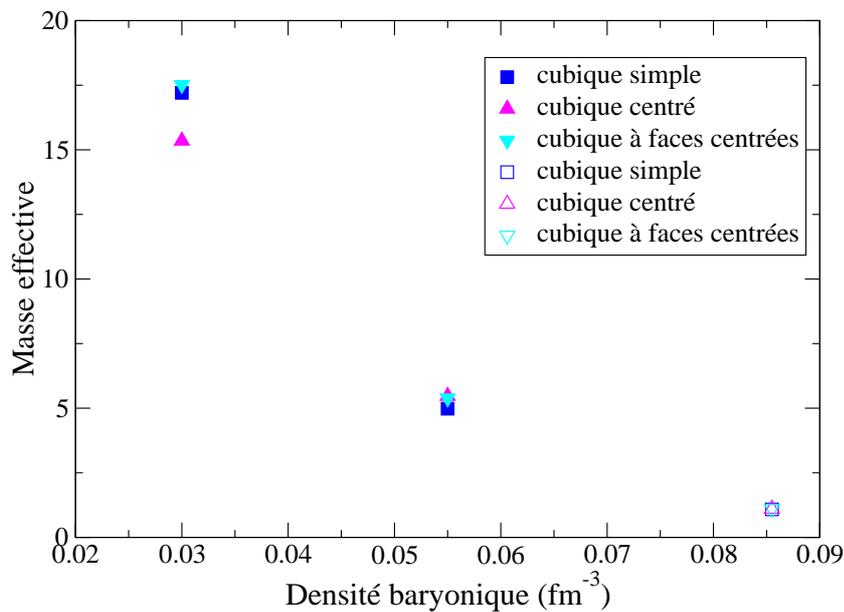


FIGURE 11.21 – Masse effective m_*/m_n des neutrons de conduction dans l'écorce calculée avec le modèle de Oyamatsu & Yamada (1994).

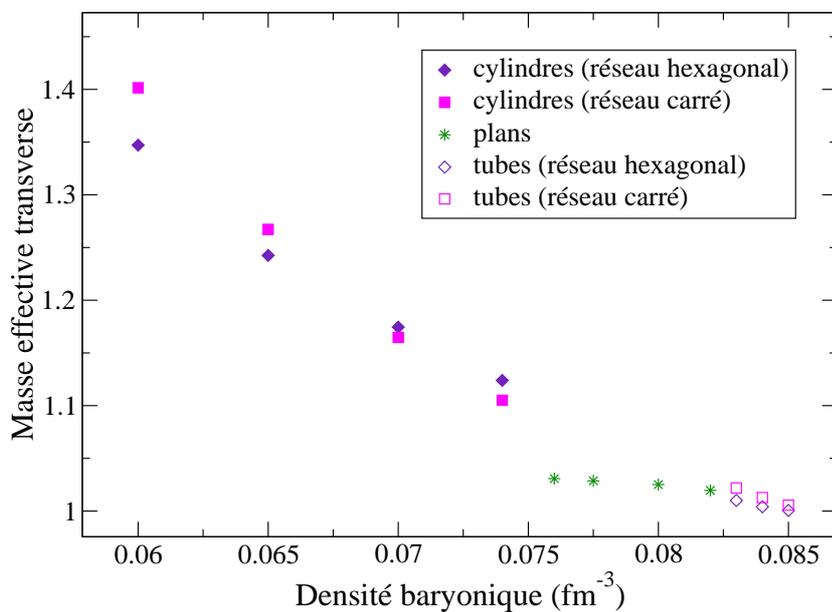


FIGURE 11.22 – Masse effective transverse m_*^\perp/m_n des neutrons de conduction dans les phases exotiques de l'écorce calculée avec le modèle de Oyamatsu & Yamada (1994).

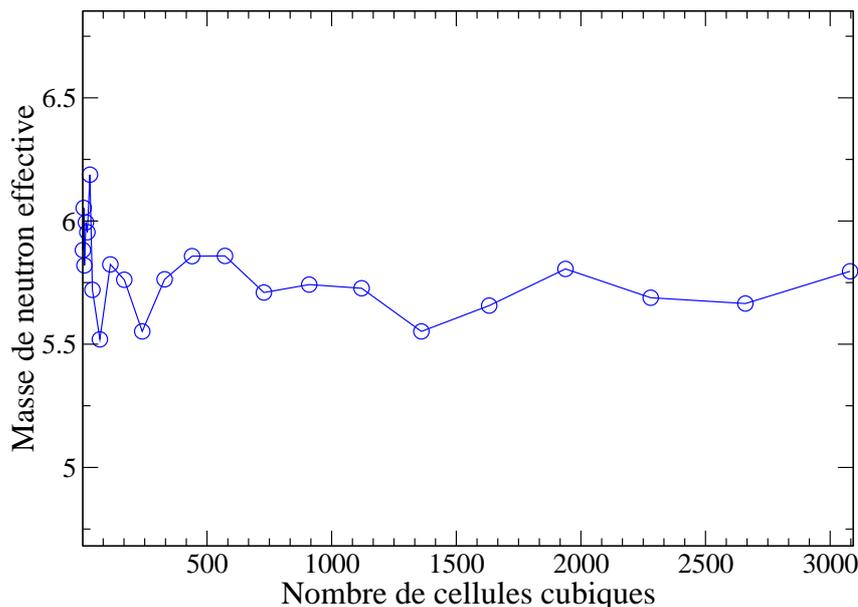


FIGURE 11.23 – Convergence de la masse effective m_*/m_n en fonction du nombre de cubes pour l'intégration sur la surface de Fermi par la méthode de Gilat-Raubenheimer. Les points représentés ont été calculés pour la densité baryonique $n_b = 0.055 \text{ fm}^{-3}$ avec des noyaux disposés dans un réseau cubique centré.

cette raison que ces phases ont un comportement plus proche des cristaux liquides que des cristaux.

Nous avons trouvé que la masse effective m_* est fortement augmentée à basse densité, atteignant même $m_* \simeq 15 m_n$ pour la densité baryonique $n_b = 0.03 \text{ fm}^{-3}$. Plus profondément dans l'écorce, la renormalisation est moins importante et la masse effective tend vers la masse ordinaire $m_* \sim m_n$ à très haute densité à la limite de l'interface entre l'écorce et le manteau. Nous pouvons observer la même tendance dans la masse effective pour les phases exotiques, avec cependant des effets moins prononcés. Dans tous les cas, la structure du cristal a peu d'influence sur les résultats.

Nous avons trouvé que l'aire de la surface de Fermi est fortement réduite dans le milieu de l'écorce interne, et tend vers l'expression du gaz de Fermi à la frontière entre l'écorce et le manteau comme le montrent les figures 11.25 et 11.27. D'après la discussion précédente, les déchirures de la sphère de Fermi sont d'autant plus significatives que les inhomogénéités du milieu sont marquées. C'est la raison pour laquelle, la diminution de l'aire de la surface de Fermi est moins importante à haute densité, lorsque les noyaux sont très proches les uns des autres de telle sorte que le potentiel moyen ressenti par un neutron est essentiellement constant. Les trous dans la surface de Fermi sont très nombreux mais aussi très petits. La surface de Fermi dépliée est alors très proche d'une sphère et donc $\mathcal{K} \simeq n_f/m_n$: la masse effective est essentiellement égale à la masse ordinaire $m_* \simeq m_n$.

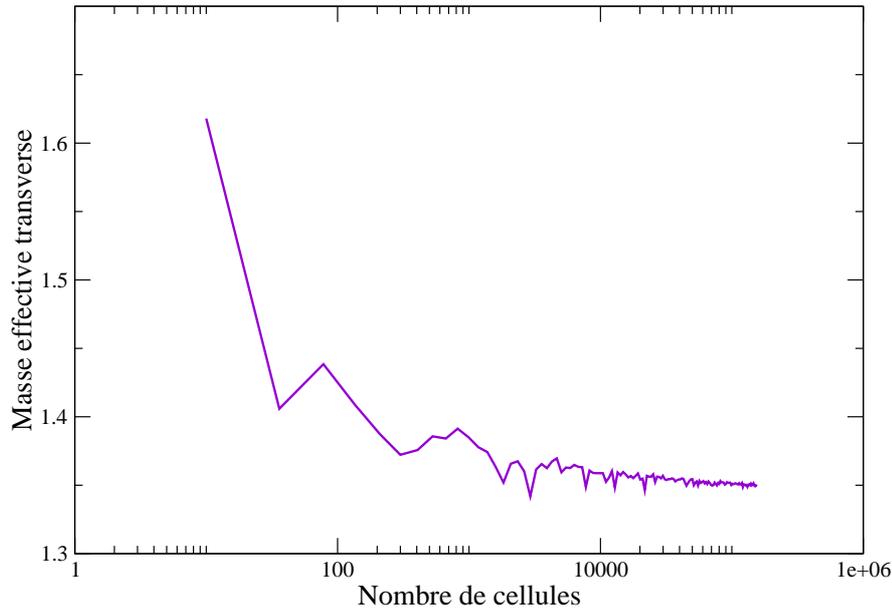


FIGURE 11.24 – Convergence de la masse effective transverse m_*^\perp/m_n en fonction du nombre de cellules pour l'intégration sur la surface de Fermi. Les points représentés ont été calculés pour la densité baryonique $n_b = 0.06 \text{ fm}^{-3}$ avec des noyaux cylindriques disposés dans un réseau hexagonal.

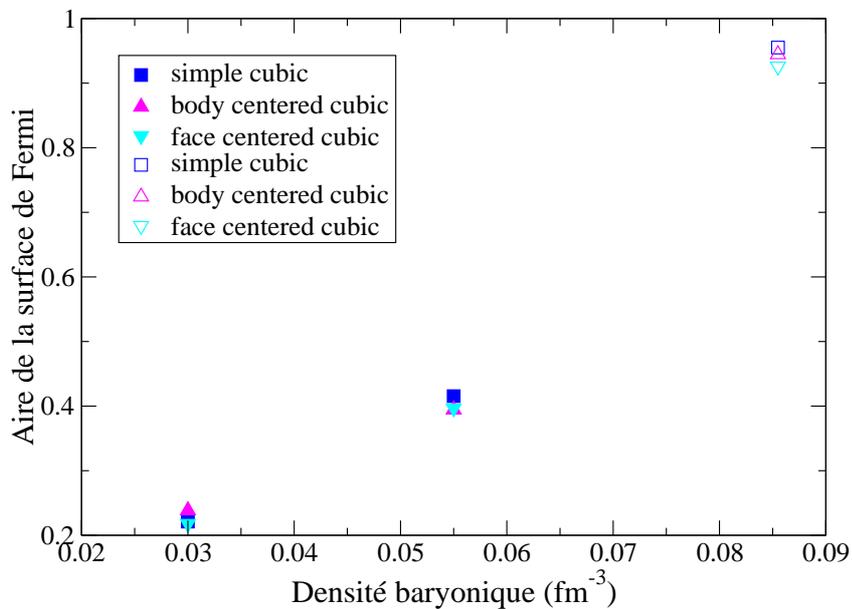


FIGURE 11.25 – Aire de la surface de Fermi des neutrons calculée avec le modèle de Oyamatsu & Yamada (1994).

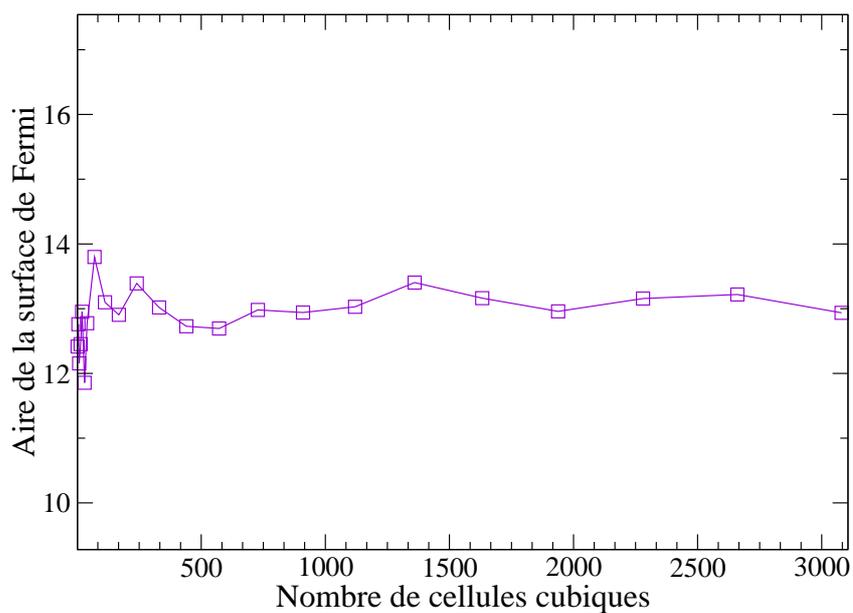


FIGURE 11.26 – Convergence de l’aire de la surface de Fermi S/S_{gaz} en fonction du nombre de cubes pour l’intégration sur la surface de Fermi par la méthode de Gilat-Raubenheimer. Les points représentés ont été calculés pour la densité baryonique $n_b = 0.055 \text{ fm}^{-3}$ avec des noyaux disposés dans un réseau cubique centré.

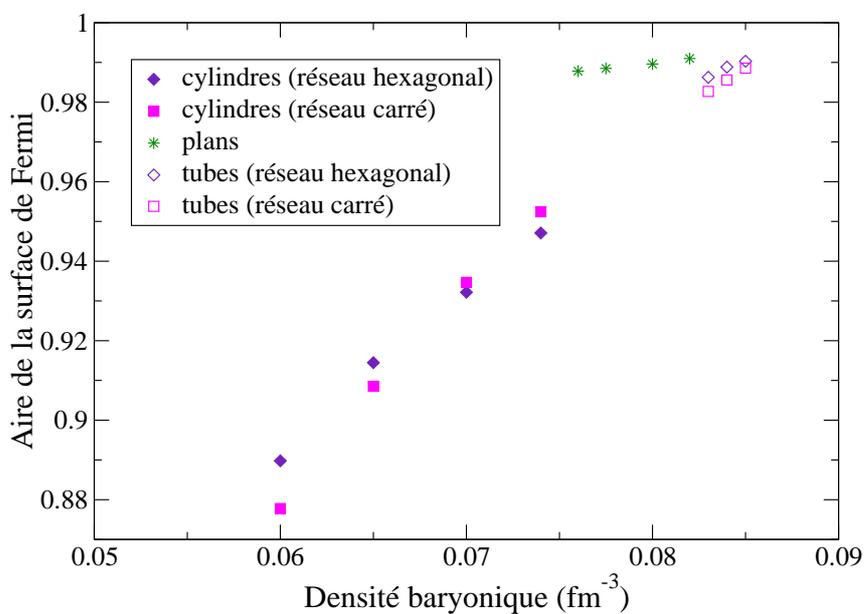


FIGURE 11.27 – Aire de la surface de Fermi des neutrons dans les phases exotiques de l’écorce calculée avec le modèle de Oyamatsu & Yamada (1994).

Une manifestation, peut-être un peu plus intuitive, de ces trous dans la surface de Fermi est fournie par le calcul de la vitesse moyenne des neutrons au niveau de Fermi, définie par

$$\bar{v}_F = \frac{1}{S_F} \oint_{S_F} v \, dS_F. \quad (11.89)$$

Dans l'hypothèse où les neutrons de conduction sont traités comme des particules libres, cette vitesse se calcule aisément et est donnée par la formule

$$v_{\text{gas}} = \frac{\hbar k_F}{m_n}. \quad (11.90)$$

Dans le cas général, nous pouvons exprimer la vitesse moyenne à l'aide de la masse effective m_* par l'expression

$$\frac{\bar{v}_F}{v_{\text{gaz}}} = \frac{S_{\text{gaz}}}{S_F} \frac{m_n}{m_*}. \quad (11.91)$$

Ainsi pour la densité baryonique $n_b = 0.03 \text{ fm}^{-3}$, le rapport entre la vitesse de Fermi et la vitesse d'un gaz de Fermi est de l'ordre de $1/3$. Ce rapport augmente avec la densité. Ainsi il est de l'ordre de $1/2$ à la densité $n_b = 0.055 \text{ fm}^{-3}$, puis tend vers l'unité lorsque la densité approche de la densité de transition entre l'écorce et les régions internes homogènes. La réduction de la vitesse de Fermi traduit la diffusion de Bragg des neutrons de conduction par les noyaux.

Ainsi les deux effets, à savoir la réduction de l'aire de la surface de Fermi d'une part et la réduction de la vitesse de Fermi d'autre part concourent à augmenter fortement la masse effective m_* dans les couches intermédiaires de l'écorce interne.

11.2.7 Effets du couplage spin-orbit

Nous avons vus que le couplage spin-orbit est négligeable dans les couches profondes de l'écorce. Néanmoins ce n'est probablement plus le cas à plus basse densité. La présence d'un terme de couplage spin-orbit dans l'équation de Schrödinger préserve la symétrie du réseau ce qui implique que les fonctions d'onde à une particule peuvent toujours s'exprimer comme des états de Bloch. L'effet le plus important du couplage spin-orbit est de lever certaines dégénérescences en brisant la symétrie entre les deux polarisations de spins. Ainsi des bandes qui se croisaient dans l'espace \mathbf{k} en l'absence de ce terme, peuvent désormais se repousser. Autrement dit la présence du couplage spin-orbit ouvre de nouveaux trous dans la surface de Fermi! Dans le voisinage du vecteur d'onde correspondant, la vitesse de groupe de ces états est donc fortement réduite. Par conséquent, si une telle situation se produit autour du niveau de Fermi, la région associée dans l'espace \mathbf{k} donnera une contribution beaucoup plus petite au scalaire de mobilité \mathcal{K} . Comme la densité n'est pas très sensible au détail de la structure de bandes, nous pouvons finalement en conclure que le couplage spin-orbit aura pour effet principal d'augmenter la masse effective m_* par rapport à la valeur obtenue en négligeant ce terme.

En général, le calcul des bandes d'énergies en présence d'un couplage spin-orbit est numériquement très lourd puisque les matrices de l'Hamiltonien et de recouvrement sont non

seulement complexes mais aussi leur taille est doublée puisque leurs éléments dépendent du spin. Nous allons donc simplement explorer l'effet du couplage spin-orbit dans le cas des noyaux cylindriques, pour lequel les temps de calculs ne sont pas trop prohibitifs. Néanmoins dans ces phases, le couplage spin-orbit est très faible et c'est d'ailleurs pour cette raison que nous l'avons négligé en premier lieu. Nous avons recalculé la masse effective m_* pour la densité baryonique $n_b = 0.06 \text{ fm}^{-3}$.

La fonction d'onde est ainsi développée en ondes planes en tenant compte explicitement du spineur de Pauli $|\chi\rangle$:

$$\langle \mathbf{r}\sigma | \mathbf{k}_\alpha \rangle \equiv \frac{1}{a_{\text{Oy}}} e^{i\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{r}} \chi_{\sigma_\alpha}, \quad (11.92)$$

en notant $\sigma_\alpha = \uparrow, \downarrow$ et $\mathbf{k}_\alpha \equiv \mathbf{k} + \mathbf{K}_\alpha$, avec

$$\chi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (11.93)$$

Le potentiel spin-orbit, toujours dans le cadre du modèle de Oyamatsu et Yamada, est du type

$$\hat{V}_{\text{LS}}\{\mathbf{r}\} = f\{r\} \hat{l}_z \hat{\sigma}_z, \quad (11.94)$$

avec $\hat{l}_z \equiv x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$

$$\hat{\sigma}_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (11.95)$$

et

$$f\{r\} \equiv \frac{1}{2r} \left(\lambda_1 \frac{dn_b}{dr} - \lambda_2 \frac{d}{dr}(n_n - n_p) \right). \quad (11.96)$$

Les paramètres λ_1 et λ_2 ont été ajustés par Oyamatsu et Yamada de façon à reproduire la séquence correcte des états à une particule du plomb ^{208}Pb . Nous avons utilisé les paramètres du modèle I, à savoir $\lambda_1 = 175.8 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^5$ et $\lambda_2 = 16.39 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^5$.

Les éléments de matrices entre des ondes planes sont données par

$$\langle \mathbf{k}_\alpha | \hat{V}_{\text{LS}} | \mathbf{k}_\beta \rangle = \frac{1}{a_{\text{Oy}}^2} \int_{\text{cell}} d^2r e^{i(\mathbf{K}_\alpha - \mathbf{K}_\beta) \cdot \mathbf{r}} f\{r\} (x\hbar k_{\beta y} - y\hbar k_{\beta x}) \chi_{\sigma_\alpha}^\dagger \sigma_z \chi_{\sigma_\beta}. \quad (11.97)$$

La fonction $f\{r\}$ est essentiellement nulle en dehors des noyaux parce que les gradients de densités sont négligeables, et ne dépend à l'intérieur d'une cellule de W-S que de la distance à l'axe cylindrique du noyau. Par conséquent, les éléments de matrice se simplifient

$$\langle \mathbf{k}_\alpha | \hat{V}_{\text{LS}} | \mathbf{k}_\beta \rangle = \frac{1}{a_{\text{Oy}}^2} \int_0^{R_{\text{WS}}} dr \int_0^{2\pi} d\theta r^2 f\{r\} e^{i(\mathbf{K}_\alpha - \mathbf{K}_\beta) \cdot \mathbf{r}} (\hbar k_{\beta y} \cos \theta - y\hbar k_{\beta x} \sin \theta) \chi_{\sigma_\alpha}^\dagger \sigma_z \chi_{\sigma_\beta}. \quad (11.98)$$

Nous avons à calculer deux types d'intégrales :

$$I_1\{\mathbf{q}, r\} \equiv \int_0^{2\pi} d\theta \cos \theta e^{i(q_x \cos \theta + q_y \sin \theta)r} \quad (11.99)$$

$$I_2\{\mathbf{q}, r\} \equiv \int_0^{2\pi} d\theta \sin \theta e^{i(q_x \cos \theta + q_y \sin \theta)r} . \quad (11.100)$$

En introduisant les variables q et ϕ définies par

$$q \equiv \sqrt{q_x^2 + q_y^2}, \quad \cos \phi \equiv \frac{q_x}{q}, \quad \sin \phi \equiv \frac{q_y}{q} \quad (11.101)$$

nous pouvons réécrire ces intégrales comme

$$I_1\{\mathbf{q}, r\} = \int_0^{2\pi} d\theta \cos \theta e^{iqr \cos(\theta-\phi)} \quad (11.102)$$

$$I_2\{\mathbf{q}, r\} = \int_0^{2\pi} d\theta \sin \theta e^{iqr \cos(\theta-\phi)} . \quad (11.103)$$

Il suffit de calculer une seule de ces intégrales puisque en intégrant par partie, nous avons la relation

$$I_2\{\mathbf{q}, r\} = I_1\{\mathbf{q}, r\} \tan \phi . \quad (11.104)$$

En développant l'onde plane en harmonique cylindriques par la formule de Jacobi-Anger

$$e^{iqr \cos(\theta-\phi)} = \sum_{n=0}^{\infty} i^n J_n\{qr\} e^{in(\theta-\phi)} , \quad (11.105)$$

nous trouvons

$$I_1\{\mathbf{q}, r\} = 2i\pi J_1\{qr\} \cos \phi . \quad (11.106)$$

Après quelques simplifications, les éléments de matrice du couplage spin-orbit s'exprime sous une forme manifestement hermitique

$$\langle \mathbf{k}_\alpha | \hat{V}_{\text{LS}} | \mathbf{k}_\beta \rangle = \frac{2i\pi}{a_{\text{Oy}}^2} \frac{k_{\beta x} k_{\alpha y} - k_{\beta y} k_{\alpha x}}{|\mathbf{K}_\alpha - \mathbf{K}_\beta|} \chi_{\sigma_\alpha}^\dagger \sigma_z \chi_{\sigma_\beta} \int_0^{R_{\text{WS}}} dr r^2 f\{r\} J_1\{|\mathbf{K}_\alpha - \mathbf{K}_\beta|r\} . \quad (11.107)$$

Les levées de dégénérescences liées à la présence du couplage spin-orbit sont clairement visibles sur les figures 11.28 et 11.29. Les effets, certes faibles, se traduisent par une légère augmentation de la masse effective, de $m_\star^\perp/m_n = 1.35$ sans spin-orbit à $m_\star^\perp/m_n = 1.37$ avec spin-orbit. De même, l'aire de la surface de Fermi est légèrement réduite, de $S_{\text{F}}/S_{\text{gaz}} = 0.89$ à $S_{\text{F}}/S_{\text{gaz}} = 0.88$, ce qui confirme l'ouverture de nouveaux trous dans la surface de Fermi.

11.3 Evolution de la masse effective à travers l'écorce interne

D'après les modèles phénoménologiques précédents, nous pouvons dégager certaines tendances en ce qui concerne la masse effective mésoscopique. Nous avons vu que le scalaire

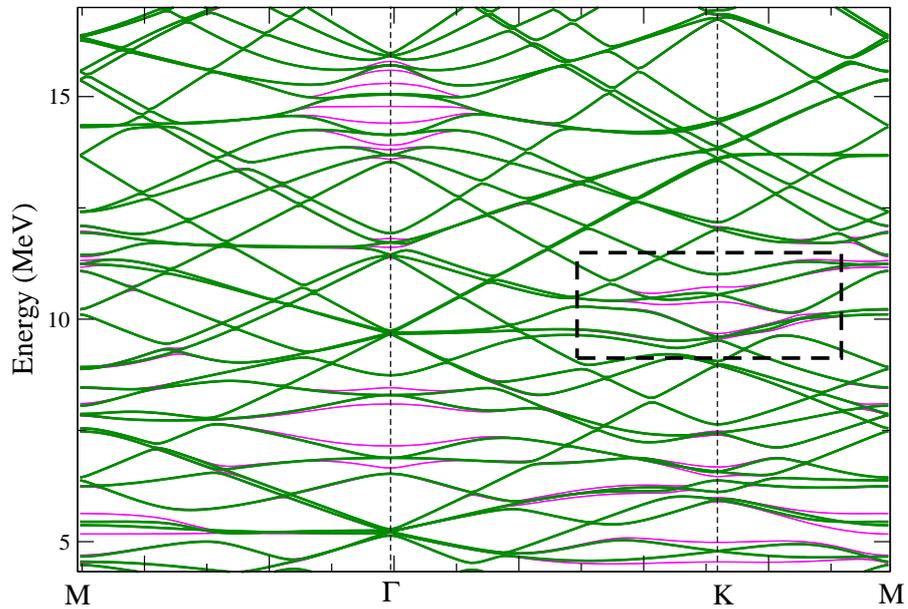


FIGURE 11.28 – Structure de bandes des neutrons de conduction, avec (ligne fine) et sans (ligne épaisse) couplage spin-orbit, calculée avec le modèle de Oyamatsu & Yamada (1994) pour des noyaux cylindriques dans un réseau hexagonal et $n_b = 0.06 \text{ fm}^{-3}$.

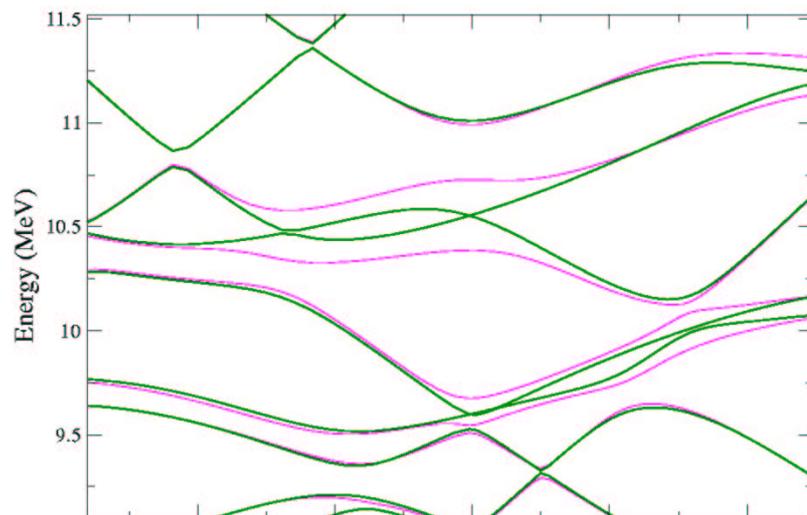


FIGURE 11.29 – Zoom de la structure de bandes des neutrons de conduction du cadre de la figure. Les levées de dégénérescence sont clairement visibles.

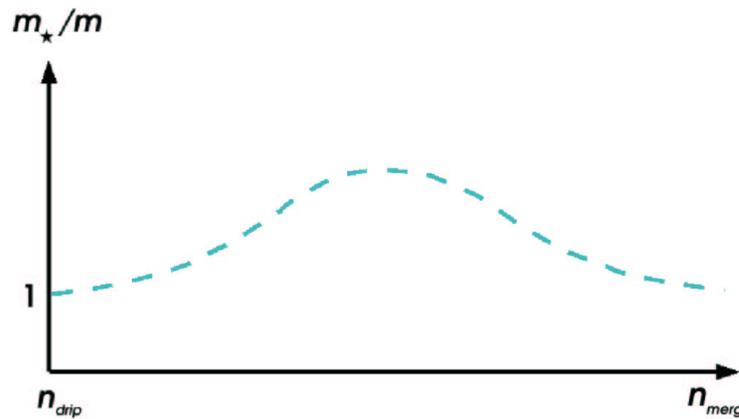


FIGURE 11.30 – Evolution schématique de la masse effective de neutron (les fluctuations liées aux effets de couche étant moyennées) à travers l'écorce interne.

de mobilité \mathcal{K} augmente avec la densité, partant de zéro dans les couches externes où tous les neutrons sont liés aux noyaux ($v^i = 0$ pour tous les états occupés), et atteignant sa valeur maximale dans le manteau homogène.

A basse densité, lorsque la densité de neutrons de conduction est négligeable devant la densité totale de neutrons, $n_f \ll n_n$, le champ moyen ressenti par un neutron est très grand au voisinage des noyaux (le puits de potentiel U_n est très profond et varie de façon abrupte) mais la fraction de la cellule occupée par les noyaux est très petite de telle sorte que les neutrons de conduction ont une probabilité faible d'être diffusés par des noyaux et sont donc essentiellement libres. Par conséquent, le coefficient de mobilité est approximativement donné par $\mathcal{K} \simeq n_f/m_n$ (en supposant qu'un état de conduction est défini de telle sorte que la vitesse de groupe associée est très différente de zéro).

A très haute densité, lorsque les noyaux sont très proches les uns des autres, les neutrons sont plongés dans un champ moyen dont les variations spatiales sont très faibles (le potentiel U_n est essentiellement constant). Comme de plus la plupart des neutrons ne sont pas liés aux noyaux, $n_f \simeq n_n$, nous avons $m_* \simeq m_n$.

Les effets les plus importants des diffractions de Bragg se manifestent donc dans les couches intermédiaires de l'écorce interne. Ceci est résumé dans le schéma de la figure 11.30.

11.4 Calculs Hartree-Fock autocohérents

Dans les sections précédentes, nous avons réussi à déduire grossièrement l'évolution de la masse effective en fonction de la densité, en raisonnant principalement sur la topologie de la surface de Fermi. Les arguments, que nous avons développés dans le cadre de modèles phénoménologiques simplifiés, sont néanmoins très généraux. Ils s'appuient essentiellement sur l'approximation de particules indépendantes. C'est pourquoi, nous pouvons penser que

les conclusions que nous en avons tirées, restent qualitativement valides dans des modèles plus réalistes. Nous avons décidé de le vérifier en procédant à un calcul Skyrme-Hartree-Fock.

Nous supposons que la matière nucléaire est non polarisée, autrement dit les densités de spin sont nulles, $\mathbf{J}_q\{\mathbf{r}\} = 0$ avec $q = n, p$. Nous négligerons également le couplage spin-orbit. D'après la discussion de la section 11.2.7, cela signifie que la masse effective de neutron m_* que nous obtiendrons sera seulement une borne inférieure du cas plus général qui inclut les termes de couplage spin-orbit.

Dans l'approximation Hartree-Fock, les neutrons sont donc décrits par une équation de Schrödinger du type

$$-\nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2m_n^\oplus\{\mathbf{r}\}} \nabla \varphi_\alpha + U_n\{\mathbf{r}\}\varphi_\alpha = \mathcal{E}_\alpha \varphi_\alpha, \quad (11.108)$$

avec les conditions aux limites de Bloch. Les expressions du potentiel moyen et de la masse effective de Skyrme ont été données au chapitre 8 sur l'approximation Hartree-Fock.

11.4.1 Traitement semi-classique des protons

Par souci de simplicité, nous avons décidé de ne traiter de façon autocohérente que les neutrons puisque ce sont surtout pour ces derniers que l'approximation de W-S couramment employée n'est pas justifiée. Nous supposerons donc connue la distribution de protons $n_p\{\mathbf{r}\}$. Néanmoins les protons contribuent au champ moyen ressenti par un neutron, non seulement à travers la densité mais également par l'intermédiaire de la densité cinétique $\tau_p\{\mathbf{r}\}$. Nous traiterons cette dernière dans l'approximation de semi-classique Thomas-Fermi étendue au deuxième ordre. Dans cette approximation, la densité cinétique s'exprime comme une fonctionnelle de la densité $n_p\{\mathbf{r}\}$ et se décompose sous la forme

$$\tau_p\{\mathbf{r}\} = \tau_{\text{TF}}\{\mathbf{r}\} + \tau_{\text{W}}\{\mathbf{r}\} + \tau_{\text{NL}}\{\mathbf{r}\} \quad (11.109)$$

dans laquelle, τ_{TF} , τ_{W} et τ_{NL} représentent respectivement les contributions de Thomas-Fermi, de Weiszäcker et les contributions issues des termes non locaux dans les équations Hartree-Fock.

Le terme de Thomas-Fermi, donné par l'expression

$$\tau_{\text{TF}}\{\mathbf{r}\} = \frac{3}{5}(3\pi^2)^{2/3}n_p\{\mathbf{r}\}^{5/3}, \quad (11.110)$$

s'obtient en supposant que le fluide de protons est localement assimilable à un gaz de Fermi de même densité. Plus généralement l'expression de la densité cinétique se déduit d'un développement semi classique en puissances de \hbar par la méthode de Wigner-Kirkwood (voir Brack *et al.* (1985)). Le terme de Thomas-Fermi représente le terme d'ordre zéro. Le terme de Weiszäcker est du second ordre et est donné par

$$\tau_{\text{W}}\{\mathbf{r}\} = \frac{1}{36} \frac{(\nabla n_p\{\mathbf{r}\})^2}{n_p\{\mathbf{r}\}} + \frac{1}{3} \Delta n_p\{\mathbf{r}\}. \quad (11.111)$$

Enfin les termes non locaux (deuxième ordre) s'expriment par la formule (en négligeant le couplage spin-orbit)

$$\tau_{NL}\{n_p\} = \frac{1}{6} \frac{\nabla n_p \cdot \nabla \mathcal{M}}{\mathcal{M}} + \frac{1}{6} n_p \frac{\Delta \mathcal{M}}{\mathcal{M}} - \frac{1}{12} n_p \left(\frac{\nabla \mathcal{M}}{\mathcal{M}} \right)^2, \quad (11.112)$$

avec

$$\mathcal{M} \equiv \frac{m_p}{m_p^\oplus}, \quad (11.113)$$

en notant $m_p^\oplus\{\mathbf{r}\}$ la masse locale de protons obtenue dans l'approximation Hartree-Fock avec une interaction de Skyrme.

11.4.2 Méthode de calculs

Nous avons résolu de façon autocohérente les équations Hartree-Fock pour les neutrons, en choisissant comme conditions initiales, les profils de densités obtenus par Oyamatsu (1993), correspondant à la densité baryonique $n_b = 0.055 \text{ fm}^{-3}$. Nous avons supposé que la structure de l'écorce était cubique simple. Comme dans cette région profonde de l'écorce interne, les densités varient lentement, nous avons employé la méthode des ondes planes.

Un des avantages de cette méthode est que le gradient spatial ∇ est diagonal dans la base de Fourier. Par exemple, les coefficients de Fourier du gradient de la fonction d'onde sont simplement de la forme $i(\mathbf{k} + \mathbf{K})\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\}$.

La méthode des ondes planes offre également la possibilité d'employer des transformations de Fourier rapides. Une fonction périodique $\mathcal{F}\{\mathbf{r}\}$ quelconque admet un développement en séries de Fourier du type

$$\mathcal{F}\{\mathbf{r}\} = \sum_{\mathbf{K}} \tilde{\mathcal{F}}\{\mathbf{K}\} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}, \quad (11.114)$$

avec

$$\tilde{\mathcal{F}}\{\mathbf{K}\} = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \int d^3r \mathcal{F}\{\mathbf{r}\} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}. \quad (11.115)$$

En pratique il est nécessaire de tronquer les sommations sur les coefficients de Fourier et de ne retenir que N termes. Dans des transformations de Fourier rapides, les intégrales spatiales sont remplacées par des sommations discrètes sur une grille uniforme de N points dans une maille élémentaire du cristal

$$\tilde{\mathcal{F}}\{\mathbf{K}\} \simeq \sum_{\mathbf{r}} \mathcal{F}\{\mathbf{r}\} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}. \quad (11.116)$$

Le passage de la représentation réelle $\mathcal{F}\{\mathbf{r}\}$ à la représentation de Fourier $\tilde{\mathcal{F}}\{\mathbf{K}\}$ ou l'inverse s'effectue en $\sim N \log N$ opérations au lieu de $\sim N^2$, ce qui représente un gain important dans les calculs autocohérents.

A chaque pas d'itérations, il est nécessaire de recalculer la densité locale de neutrons $n_n\{\mathbf{r}\}$ et la densité cinétique $\tau_n\{\mathbf{r}\}$ qui s'expriment par des intégrales dans la première zone de Brillouin, que nous avons calculées par la méthode des points spéciaux.

Dans la base de Fourier, la fonction d'onde et son gradient spatial sont donnés par

$$\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{K}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}, \quad (11.117)$$

$$\nabla\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{K}} i(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}. \quad (11.118)$$

Comme les densités $n_n\{\mathbf{r}\}$ et $\tau_n\{\mathbf{r}\}$ ne dépendent que de $|\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}|^2$ et $|\nabla\varphi_{\mathbf{k}}\{\mathbf{r}\}|^2$ respectivement, Il n'est pas nécessaire d'inclure les facteurs de phase $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ dans les équations. Pour chacun des vecteurs d'ondes \mathbf{k} , nous avons ainsi calculé la fonction d'onde et son gradient spatial par transformation de Fourier rapide des coefficients $\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\}$ obtenus par diagonalisation, et $i(\mathbf{k} + \mathbf{K})\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}\{\mathbf{K}\}$ respectivement.

Comme dans la méthode des points spéciaux, les intégrales sont factorisées dans un domaine irréductible de la première zone de Brillouin, les densités obtenues ne sont pas nécessairement symétriques. C'est pour cette raison que les densités sont projetées sur les fonction étoiles (que nous avons déjà introduites au chapitre 10) définies par

$$\mathcal{S}_s\{\mathbf{r}\} = \frac{1}{|\mathcal{P}|} \sum_{\mathcal{P}} e^{i\mathcal{P}\mathbf{K}_s\cdot\mathbf{r}}, \quad (11.119)$$

où \mathbf{K}_s représente un vecteur de translation du réseau réciproque, avec la convention que $\mathbf{K}_0 = \mathbf{0}$ que $|\mathbf{K}_{s_1}| \geq |\mathbf{K}_{s_2}|$ si et seulement si $s_1 \geq s_2$. Ces fonctions étoiles possèdent toutes les symétries du cristal. Autrement dit pour n'importe quelles rotation \mathcal{P} et translation du réseau \mathbf{T} (nous nous restreignons ici à des groupes d'espace symmorphiques), celles-ci vérifient

$$\mathcal{S}_s\{\mathcal{P}\mathbf{r} + \mathbf{T}\} = \mathcal{S}_s\{\mathbf{r}\}. \quad (11.120)$$

Ces fonctions sont également orthogonales et satisfont à la relation

$$\int_{\text{cell}} d^3r \mathcal{S}_{s_1}\{\mathbf{r}\}^* \mathcal{S}_{s_2}\{\mathbf{r}\} = \delta_{s_1, s_2} \frac{\mathcal{V}_{\text{cell}}}{n_{s_1}}, \quad (11.121)$$

dans laquelle n_{s_1} représente le nombre de vecteurs de translation du réseau réciproque inéquivalents de la forme $\mathcal{P}\mathbf{K}_s$.

Pour les structures cubiques que nous avons considérées, le groupe ponctuel contient l'inversion spatiale et par suite les fonctions étoiles sont réelles. Quel que soit le réseau cubique considéré, le groupe ponctuel, O_h , agissant sur un vecteur \mathbf{K} est l'ensemble des permutation-inversions des trois composantes et possède donc $|\mathcal{P}| = 3! \times 2^3 = 48$ éléments.

Une fonction périodique peut ainsi être développée en termes de fonctions étoiles

$$\mathcal{F}\{\mathbf{r}\} = \sum_s \tilde{\mathcal{F}}_s \mathcal{S}_s\{\mathbf{r}\}. \quad (11.122)$$

En utilisant la relation d'orthogonalité, les coefficients $\tilde{\mathcal{F}}_s$ sont donnés par la formule

$$\tilde{\mathcal{F}}_s = \frac{n_s}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \int d^3r \mathcal{F}\{\mathbf{r}\} \mathcal{S}_s^*\{\mathbf{r}\}. \quad (11.123)$$

D'après la définition des fonctions étoiles et l'orthogonalité des ondes planes, les coefficients étoiles s'expriment en termes des composantes de Fourier $\tilde{\mathcal{F}}\{\mathbf{K}\}$ par la relation

$$\tilde{\mathcal{F}}_s = \frac{n_s}{|\mathcal{P}|} \sum_{\mathcal{P}} \tilde{\mathcal{F}}\{\mathcal{P}\mathbf{K}_s\}. \quad (11.124)$$

Nous avons ainsi obtenu les coefficients étoiles des densités $n_n\{\mathbf{r}\}$ et $\tau_n\{\mathbf{r}\}$, en calculant leur transformation de Fourier inverse et en symétrisant les coefficients de Fourier.

A chaque itération, de nouvelles densités $n_{n,\text{out}}\{\mathbf{r}\}$ et $\tau_{n,\text{out}}\{\mathbf{r}\}$ sont calculées puis mélangées aux précédentes pour fournir de nouvelles conditions initiales

$$n_{n,\text{in}}^{(i+1)} = (1 - \alpha)n_{n,\text{in}}^{(i)} + \alpha n_{n,\text{out}}^{(i)}, \quad \tau_{n,\text{in}}^{(i+1)} = (1 - \alpha)\tau_{n,\text{in}}^{(i)} + \alpha \tau_{n,\text{out}}^{(i)}. \quad (11.125)$$

Le paramètre de mélange est typiquement $\alpha \ll 1$.

11.4.3 Résultats et discussion

Afin de réduire les temps de calculs, notamment pour la détermination de l'énergie de Fermi, nous avons employé la méthode de Baldereschi dans laquelle une intégrale dans la zone de Brillouin est approximée par la valeur de l'intégrand en un seul point. Nous avons adopté comme critère de convergence la densité $n_n\{\mathbf{r}\}$. Pour les transformations de Fourier rapides, nous avons utilisé une grille uniforme de $17 \times 17 \times 17$ points. Une convergence inférieure à 10^{-3} près avec $\alpha = 0.1$ a été atteinte au bout de 38 itérations. L'énergie de Fermi est $\mu = 12.231$ MeV. Les densités $n_n\{\mathbf{r}\}$ et $\tau_n\{\mathbf{r}\}$, sont représentées sur les figures 11.31 et 11.32. Nous n'observons pas de fluctuations importantes des densités entre les noyaux comme c'est le cas dans l'approximation de W-S. Nous pouvons également vérifier que les densités sont essentiellement constantes au coeur des noyaux et à l'extérieur, comme nous l'avons discuté dans le chapitre 8.

La masse de Skyrme $m_n^\oplus\{\mathbf{r}\}$ et le champ moyen $U_n\{\mathbf{r}\}$ sont reportés sur les figures 11.33 et 11.34. La masse de neutron $m_n^\oplus\{\mathbf{r}\}$ varie de $m_n^\oplus \sim 0.7m_n$ à l'intérieur des noyaux jusqu'à une valeur de l'ordre de $m_n^\oplus \sim 0.85m_n$ à l'extérieur. Dans tous les cas, la masse effective microscopique est toujours inférieure à la masse ordinaire m_n . La profondeur du potentiel moyen ressenti par un neutron est de l'ordre de 30 MeV.

La densité de neutrons de conduction est $n_f \simeq 0.05 \text{ fm}^{-3}$, soit environ 94% de la densité totale de neutrons. Une cellule de W-S contient environ 1200 neutrons. Le coefficient de mobilité \mathcal{K} , obtenu par la méthode de Gilat-Raubenheimer avec 1140 cellules, est réduit d'un facteur environ 2.94 par rapport au coefficient de mobilité $\mathcal{K}_{\text{gaz}} = n_f/m_n$ d'un gaz de Fermi de densité n_f . La masse effective m_\star est donc environ trois fois plus grande que la masse ordinaire m_n , en dépit d'une masse effective $m_n^\oplus\{\mathbf{r}\}/m_n$ localement inférieure 1. La masse effective mésoscopique m_\star est donc inférieure au résultat obtenu dans le modèle de Oyamatsu & Yamada (1994), ce qui peut s'expliquer par la simplicité de ce dernier modèle (notamment le fait que $m_n^\oplus\{\mathbf{r}\} = m_n$). Néanmoins l'augmentation de la masse effective mésoscopique m_\star par rapport à la masse « nue » demeure significative.

La différence entre la masse effective microscopique $m_n^\oplus\{\mathbf{r}\}$ et la masse effective macroscopique m_\star s'explique par le fait que cette dernière incorpore non seulement les effets

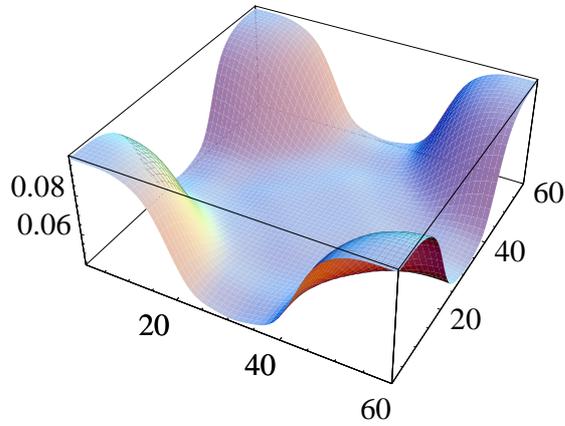


FIGURE 11.31 – Densité de neutrons $n_n\{\mathbf{r}\}$ (en fm^{-3}) obtenue dans l'approximation Skyrme-Hartree-Fock (paramétrisation SLy4) dans un plan d'indices de Miller (001) dont les coordonnées sont les points d'une grille 60×60 .

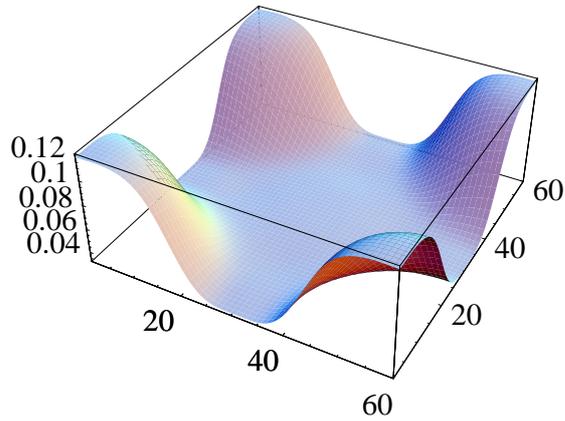


FIGURE 11.32 – Densité cinétique $\tau_n\{\mathbf{r}\}$ (en fm^{-5}) obtenue dans l'approximation Skyrme-Hartree-Fock (paramétrisation SLy4) dans un plan d'indices de Miller (001) dont les coordonnées sont les points d'une grille 60×60 .

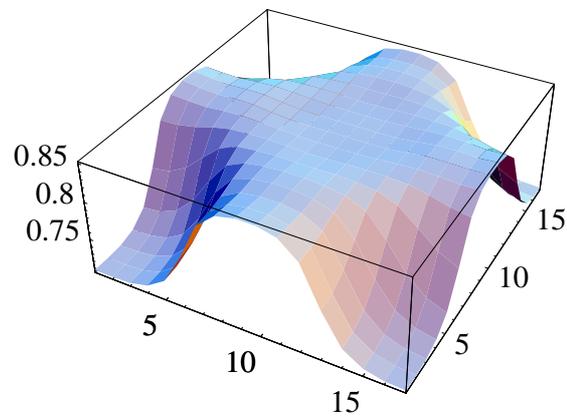


FIGURE 11.33 – Masse effective « microscopique » $m_n^{\oplus}\{\mathbf{r}\}/m_n$ obtenue dans l'approximation Skyrme-Hartree-Fock (paramétrisation SLy4) dans un plan d'indices de Miller (001) dont les coordonnées sont les points de la grille employée pour les transformées de Fourier.

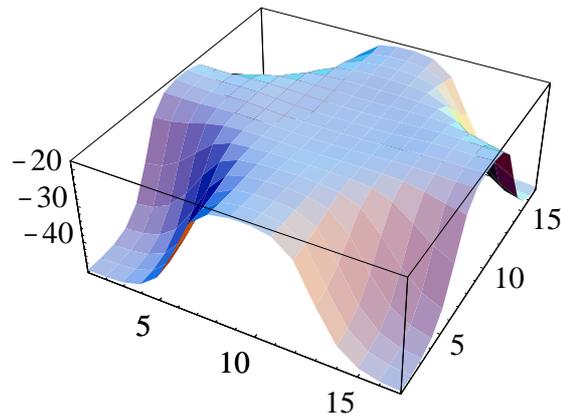


FIGURE 11.34 – Champ moyen $U_n\{\mathbf{r}\}$ (en MeV) obtenu dans l'approximation Skyrme-Hartree-Fock (paramétrisation SLy4) dans un plan d'indices de Miller (001) dont les coordonnées sont les points de la grille employée pour les transformées de Fourier.

de milieu mais également les effets géométriques liés à la diffraction de Bragg qui ne se manifestent pas à l'échelle d'un noyau ou à des échelles plus petites.

L'aire de la surface de Fermi est également diminuée d'un facteur 0.48 par rapport à la surface d'une sphère de rayon $k_F = (3\pi^2 n_n)^{1/3}$. Ceci confirme l'interprétation développée dans la section précédente, que la surface de Fermi est percée de trous.

Ce calcul autocohérent confirme les résultats obtenus avec des modèles plus phénoménologiques. Des calculs avec différentes paramétrisations des forces de Skyrme sont en cours.

11.5 Modèle à deux fluides et effets d'entraînement

Nous avons déjà signalé au chapitre 9 comment unifier les modèles à deux fluides pour le coeur et pour l'écorce interne, en comptant tous les neutrons comme des neutrons de conduction. Avec cette convention, la masse effective d'un neutron m_\star^n , définie par

$$m_\star^n \equiv \frac{n_n}{\mathcal{K}}, \quad (11.126)$$

est supérieure à la masse effective m_\star^f obtenue avec une densité de neutrons de conduction associées aux états qui contribuent physiquement au courant ($n_f < n_n$), par un facteur $n_n/n_f > 1$

$$m_\star^n = \frac{n_f n_n}{\mathcal{K} n_f} = m_\star^f \frac{n_n}{n_f}. \quad (11.127)$$

A très hautes densités, dans les couches profondes de l'écorce, les deux masses effectives sont essentiellement égales, $m_\star^f \simeq m_\star^n$, parce que $n_f \simeq n_n$. En revanche, à l'interface entre les régions externe et interne de l'écorce, très peu de neutrons sont libres, par conséquent $n_f \ll n_n$. Or d'après la discussion des sections précédentes, les effets d'entraînement pour ces neutrons libres ne sont pas très importants d'où $m_\star^f \simeq m$. Par conséquent, nous avons selon l'équation (11.127) que $m_\star^n \gg m$ et par suite $m_\star^p \gg m$ selon l'identité (5.36). Les masses effectives de neutrons et de protons divergent lorsque tous les nucléons sont confinés dans les noyaux (le coefficient de mobilité \mathcal{K} est nul contrairement à la densité de neutrons n_n donc d'après (11.126) $m_\star^n \rightarrow +\infty$).

La masse effective mésoscopique de neutron que nous avons calculée est associée à des distances grandes devant la distance entre deux plus proches noyaux mais petites devant la distance entre deux plus proches tourbillons superfluides, qui sont présents du fait de la rotation de l'étoile. A des échelles macroscopiques, très supérieures à l'espacement entre les tourbillons, nous pouvons nous attendre à ce que les masses effectives correspondantes soient plus larges encore que celles obtenues aux échelles inférieures du fait que le courant de neutrons n'est pas uniforme.

En reprenant les notations de Prix (2004), les coefficients d'entraînement ε_n et ε_p , définis par (5.39) en substituant les indices chimiques c et f par p et n respectivement, sont négatifs dans la région interne de l'écorce et positifs dans le coeur. Ces deux coefficients ne s'annulent pas exactement à l'interface entre le manteau liquide et la croûte solide

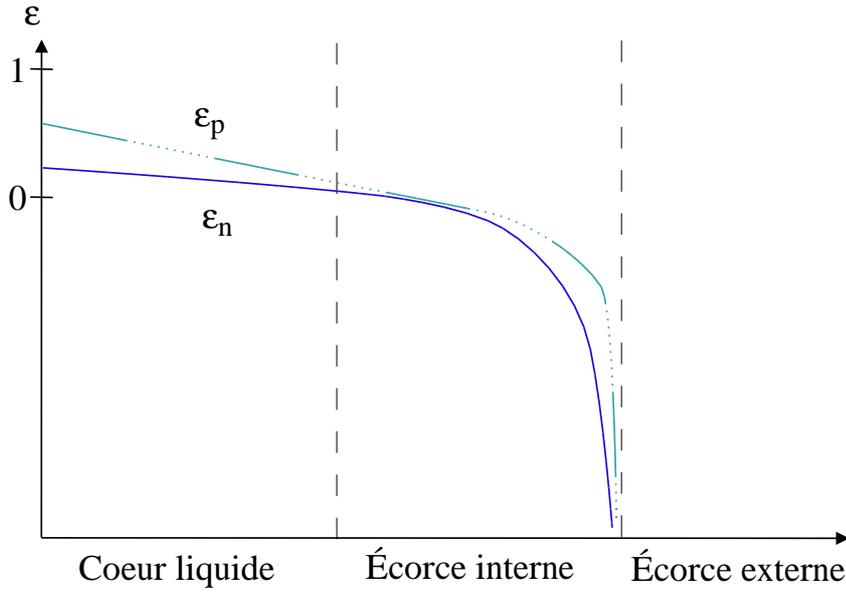


FIGURE 11.35 – Evolution très schématique des coefficients d'entraînement du modèle à deux fluides, neutrons et protons, à l'intérieur d'une étoile à neutrons.

mais probablement dans les couches les plus profondes de l'écorce, comme les calculs microscopiques des sections précédentes le suggèrent. Ces deux coefficients ne sont pas indépendants mais sont reliés par (5.40)

$$\varepsilon_n = \frac{n_p}{n_n} \varepsilon_p. \quad (11.128)$$

Le facteur n_p/n_n , qui est de l'ordre de ~ 1 en surface (matière à peu près symétrique en neutrons et protons), tend vers zéro en descendant plus en profondeur dans l'étoile à mesure que la matière devient de plus en plus riche en neutrons. Par conséquent, les coefficients d'entraînement sont proches en surface, $\varepsilon_n \lesssim \varepsilon_p$ mais à plus haute densité $\varepsilon_n \ll \varepsilon_p$. Selon la relation (11.128), ces coefficients d'entraînement s'annulent pour une même densité. Par ailleurs, les conditions (5.49) et (5.50) pour les masses effectives m_\star^n et m_\star^p , qui peuvent se réécrire sous la forme

$$m_\star^n > 1 - x_p \iff m_\star^p > x_p, \quad (11.129)$$

avec $x_p \equiv n_p/(n_n + n_p)$ la fraction protonique, impliquent des contraintes du type

$$\varepsilon_p < 1 - x_p \iff \varepsilon_n < x_p. \quad (11.130)$$

Les coefficients d'entraînement sont donc nécessairement inférieurs à 1. L'évolution des coefficients d'entraînement est résumée schématiquement sur la figure 11.35.

L'équation d'état des deux fluides est déterminée par la densité d'énergie totale $U = U_{\text{cin}} + U_{\text{int}}$, dans laquelle le terme cinétique est donné par

$$U_{\text{cin}} = \frac{1}{2} m (n_n v_n^2 + n_p v_p^2), \quad (11.131)$$

D'après l'équation (5.56), la densité d'énergie interne s'exprime sous la forme (en notant $\Delta^i = v_p^i - v_n^i$)

$$U_{\text{int}} = U_{\text{ins}}\{n_n, n_p\} - \frac{1}{2}n_n m \varepsilon_n \Delta^2. \quad (11.132)$$

Il est à noter que la densité d'énergie interne U_{int} n'est pas simplement égale à l'opposé de la densité lagrangienne correspondante $\Lambda_{\text{int}} = \Lambda - \Lambda_{\text{cin}}$ du fait de la présence de termes d'entraînement qui dépendent des vitesses.

Conclusions et perspectives

Dans la première partie de ce travail, nous avons étudié les aspects macroscopiques de l'écorce d'une étoile à neutrons dans un cadre entièrement non relativiste, de manière à faciliter le lien entre les différents niveaux de description et notamment la microphysique. Nous avons cependant adopté un point de vue quadridimensionnel afin de mettre en évidence les différences entre la théorie de Newton et la Relativité Générale. Nous avons tout d'abord décrit la structure géométrique de l'espace-temps newtonien, en montrant notamment que le principe de relativité s'exprime dans cette approche par une symétrie de jauge des lois physiques, analogue à la symétrie de jauge des équations de Maxwell en électromagnétisme. Nous avons ensuite adapté à l'espace-temps newtonien, la formulation variationnelle entièrement covariante de l'hydrodynamique d'un fluide parfait en relativité générale, initiée par Taub en 1954 et largement développée ensuite par Carter (1989). Contrairement à l'approche plus traditionnelle récemment suivie par Prix (2004), dans laquelle temps et espace sont décomposés, une formulation quadridimensionnelle apporte un éclairage géométrique nouveau à la Cartan et permet d'établir très naturellement des lois de conservation, comme celle de l'hélicité par exemple en exploitant le calcul extérieur. Nous avons étendu ce formalisme à un mélange quelconque de fluides parfaits, couplés par des effets non dissipatifs d'entraînement (Carter & Chamel (2004a, 2003)). Nous avons également montré comment construire le tenseur énergie-impulsion du système et comment déduire des invariants en examinant les propriétés de symétries de l'espace-temps newtonien et du milieu matériel. Nous avons en particulier transposé la notion de vecteurs de Killing en relativité générale dans le cadre de l'espace-temps newtonien, ce qui nous a permis de généraliser les lois de Bernoulli et le théorème du viriel. Nous avons récemment traité des phénomènes dissipatifs dans ce formalisme quadrimensionnel en introduisant un courant d'entropie (Carter & Chamel (2004b)). Dans la suite de cette étude, nous nous sommes concentrés plus spécifiquement sur des modèles à deux fluides, tels que ceux employés dans les simulations hydrodynamiques du coeur d'une étoile à neutrons. Nous avons adapté ce modèle pour décrire l'écorce interne, en considérant d'une part un superfluide de neutrons et d'autre part un fluide de noyaux et d'électrons (Carter *et al.* (2004b)).

Afin de déterminer le couplage entre ces deux fluides par des effets d'entraînement, nous avons étudié dans la deuxième partie l'écorce interne du point de vue microscopique. En dressant une analogie entre les électrons libres dans un solide ordinaire et les neutrons libres dans la croûte, nous avons montré comment évaluer les effets d'entraînement en appliquant des méthodes développées en physique du solide (Carter *et al.* (2005), Chamel

(2005)). Ces effets d'entraînement entre les deux fluides se caractérisent par l'introduction d'une masse effective « mésoscopique » de neutron. Nous avons calculé cette masse effective dans le cadre de la théorie des bandes, en traitant les neutrons libres comme des particules indépendantes soumises à un champ moyen périodique. Contrairement à la masse effective « microscopique », nous avons trouvé que la masse effective mésoscopique est supérieure à la masse « nue » et prend des valeurs très grandes dans les couches intermédiaires de l'écorce interne. Ces conclusions sont confirmées par des calculs préliminaires plus réalistes dans lesquels le champ moyen est déduit d'interactions nucléon-nucléon effectives à deux corps de type Skyrme dans l'approximation Hartree-Fock. Nous avons également récemment montré que la variation moyenne de la masse effective à travers l'écorce est qualitativement peu affectée par les effets d'appariement entre les neutrons, qui donnent lieu à la superfluidité (Carter *et al.* (2004a)). Cette renormalisation de la masse de neutrons, qui engendre à l'échelle hydrodynamique des effets d'entraînement dans le modèle à deux fluides, s'interprète comme la conséquence de la diffraction de Bragg des neutrons libres par les noyaux de l'écorce. Cet effet est ignoré dans l'approximation de Wigner-Seitz, selon laquelle les noyaux dans l'écorce sont considérés comme isolés, et qui est pourtant couramment employée depuis les travaux précurseurs de Negele & Vautherin (1973).

Les résultats de ce travail suggèrent que les effets d'entraînement dans l'écorce interne pourraient avoir des conséquences importantes sur la dynamique globale de l'étoile. Nous avons ainsi indiqué comment construire un modèle à deux fluides unifié qui puisse traiter dans un même cadre tant le coeur d'une étoile à neutrons que l'écorce interne. Ce modèle pourrait par exemple permettre d'étudier qualitativement le rôle de l'écorce dans les modes d'oscillations ou la structure de l'étoile en modifiant simplement les valeurs des coefficients d'entraînement utilisés jusqu'à présent. Nous avons aussi récemment entamé une étude sur l'origine des sauts de fréquences observés dans certains pulsars, en employant le modèle à deux fluides que nous avons développé.

En mettant en évidence la nécessité de considérer des modèles au delà de l'approximation de Wigner-Seitz appliquée depuis près de trente ans, ce travail a également révélé un domaine encore peu exploré de l'astrophysique nucléaire, que nous pourrions baptiser par l'étude des cristaux « neutroniques », en référence aux nouvelles disciplines issues de la théorie des bandes comme les cristaux photoniques ou phononiques. Ce type de formalisme pourrait d'ailleurs trouver d'autres applications dans le coeur de l'étoile, qui selon certains pourrait être formé d'un solide d'hypérons ou d'autres structures cristallines plus ou moins exotiques.

Cette étude soulève de nombreuses questions, encore sans réponses. Comment la superfluidité des neutrons est-elle affectée par la présence du solide ? Quelles sont les conséquences de la théorie des bandes sur les taux d'émissions de neutrinos et sur le refroidissement d'une étoile à neutrons ? Sachant que l'approximation de Wigner-Seitz surestime les effets de couches, comment la structure de l'écorce et la composition des noyaux sont-ils modifiés par la diffraction de Bragg ? Quel est l'effet de la présence de tourbillons superfluides sur la masse effective des neutrons ? Comment les coefficients d'entraînement sont-ils affectés par la présence d'impuretés ou de défauts dans le cristal ? Quelle est

l'influence de la température? *etc.*

Remerciements

Ce travail est l'aboutissement de trois années de recherche, réalisé au sein du Laboratoire de L'Univers et de ses Théories (LUTH) à l'observatoire de Meudon. Je voudrais remercier toute l'équipe du LUTH, notamment Ericourgoulhon et Jérôme Novak, pour leur accueil très chaleureux au sein du groupe de Cosmologie et de gravitation relativiste. Je tiens tout particulièrement à remercier Brandon Carter, qui a accepté de me diriger pendant ces trois années de thèse. Sa très grande patience à répondre à mes questions souvent naïves et les nombreuses discussions qu'elles ont suscitées, m'ont été riches d'enseignement. Je lui suis très reconnaissant aussi de m'avoir fait bénéficier de son ouverture d'esprit, de son intuition physique et de sa rigueur mathématique. Enfin ses innombrables anectodes historiques resteront un souvenir intarissable !

Je voudrais aussi vivement remercier Pawel Haensel du Centre Nicolas Copernic à Varsovie, en Pologne avec qui j'ai eu la chance de collaborer.

Je remercie les membres du jury, à commencer par Nils Andersson et Jacques Meyer qui ont accepté la lourde tâche de rapporteurs et aussi aux examinateurs Joaquin Diaz-Alonso, Richard Kerner et Nguyen Van Giaï. Je remercie également Nicolas Rivier pour avoir participé à la soutenance.

Je souhaiterais exprimer toute ma gratitude à Peter Schuck et Nguyen Van Giaï qui m'ont donné l'opportunité d'approfondir mes connaissances en physique nucléaire lors d'un stage prédoctoral à l'Institut de Physique Nucléaire d'Orsay. Je remercie également Jérôme Margueron et Elias Khan, avec qui j'ai partagé pendant quelques semaines le bureau, pour leur bienveillance et leur disponibilité à me guider dans mes recherches bibliographiques.

J'aimerais aussi adresser mes remerciements à mes collègues doctorants et post-doctorants Dorota, François, José-Luis, Elie, Loic et Anne qui ont contribué à l'ambiance très conviviale du laboratoire.

Ce travail n'aurait sans doute pas pu voir le jour sans le soutien et les encouragements de mes parents, qui m'ont offert la chance de m'engager dans la voie de la recherche scientifique et à qui je voudrais naturellement dédicacer cette thèse.

Je remercie enfin tous ceux que je n'ai pas cités et qui ont contribué de près ou de loin au bon déroulement de ces trois années de thèse.

Appendice A

Topologie et géométrie différentielle

Sommaire

A.1	Continuité et espaces topologiques	325
A.2	Variété différentiable	327
A.3	Définition des tenseurs	327
A.4	Applications linéaires tangentes et cotangentes	331
A.5	Formes différentielles et algèbre extérieure	331
A.6	Connexion et dérivée covariante	335

A.1 Continuité et espaces topologiques

« Ce point de vue topologique, c'est-à-dire des relations de situation entre les divers points d'une surface dans lesquelles on ne tient compte que de la continuité sans se préoccuper de la mesure précise des longueurs constitue une partie importante de notre notion d'espace. »

Emile Borel, *L'Espace et le Temps*, Librairie Félix Alcan, Paris (1923), p132-133.

La topologie est une façon d'étendre le concept de *continuité* entre n'importe quels ensembles et de classer ainsi des objets. Par exemple, une sphère et un tore ne sont pas topologiquement équivalents, puisqu' on ne peut pas passer de l'un à l'autre par *déformation continue* (le tore est une sphère à laquelle on a collé une poignée). En revanche, n'importe quel polyèdre convexe est équivalent à une sphère. L'ensemble de ces polyèdres est caractérisé par un même nombre d'Euler, défini par le nombre de sommets moins le nombre d'arêtes, plus le nombre de faces et qui est égal à deux. Le nombre d'Euler est un exemple d'invariant topologique. La notion de topologie est intuitive pour des surfaces parce que nous pouvons les visualiser facilement, quoique certains exemples soient trompeurs. C'est notamment le cas du fameux ruban de Moebius. Quelque soit le nombre d'enroulements,

c'est bien le même espace topologique puisque ce sont toujours les mêmes côtés qui sont identifiés !

Avant d'aborder la définition d'un espace topologique, revenons sur la notion de continuité. La continuité d'une fonction f définie dans \mathbb{R}^n à valeurs dans \mathbb{R} est définie à partir de la notion de distance entre deux points : f est dite continue en $x \in \mathbb{R}^n$ si $\forall \epsilon > 0, \exists \delta > 0 \ ||f\{y\} - f\{x\}|| < \epsilon \ \forall y \in \mathbb{R}^n \ ||y - x|| < \delta$, où $||\cdot||$ est la distance Euclidienne. Cette définition s'étend naturellement au cas où la fonction f à des valeurs dans \mathbb{R}^p , et plus généralement lorsque les espaces de définition de f et de son image sont normés. Un espace \mathbf{E} est normé lorsqu'il possède une mesure de distance d , appelée *norme*, qui est une application de $\mathbf{E} \times \mathbf{E} \mapsto \mathbb{R}$ satisfaisant les propriétés suivantes :

- ★ $d\{x, y\} > 0 \ \forall x \neq y \in \mathbf{E}$ et $d\{x, x\} = 0$ (positivité)
- ★ $d\{x, y\} = d\{y, x\}$ (symétrie)
- ★ $d\{x, y\} + d\{y, z\} \geq d\{x, z\} \ \forall x, y, z \in \mathbf{E}$ (inégalité triangulaire)

La distance euclidienne est un exemple de norme, définie par

$$d\{x, y\} = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + \dots + (x_n - y_n)^2}$$

où x_i, y_i avec $i = 1..n$ sont les composantes de x et y respectivement dans \mathbb{R}^n .

Nous voudrions néanmoins disposer d'une notion de continuité pour des espaces quelconques. Définissons tout d'abord le *voisinage* \mathbf{V} d'un point $x \in \mathbf{E}$ dans un espace normé \mathbf{E} par l'ensemble des points situés à une distance ϵ donnée de x : $\mathbf{V} = \{y \in \mathbf{E}, ||y - x|| < \epsilon\}$. Remarquons ensuite que la définition précédente de la continuité peut être reformulée de la façon suivante : $f : \mathbf{E} \mapsto \mathbf{F}$, \mathbf{E} et \mathbf{F} étant tous les deux des espaces normés, est continue si $\forall x \in \mathbf{E}$ et pour n'importe quel voisinage \mathbf{V} de $f\{x\} \in \mathbf{F}$, $f^{-1}\{\mathbf{V}\}$ est un voisinage de x . Cette notion de continuité est le fondement de la topologie.

Plus généralement, un ensemble \mathbf{E} est un *espace topologique* s'il possède des sous-ensembles appelés des *ouverts* ayant les propriétés suivantes :

- ★ l'union de deux ouverts est un ouvert
- ★ l'intersection d'un nombre *fini* d'ouverts est un ouvert
- ★ \mathbf{E} et \emptyset sont ouverts.

Un espace topologique est séparé ou de Hausdorff si à deux éléments distincts, on peut toujours trouver deux ouverts disjoints.

Le voisinage d'un point x est alors défini comme un ouvert contenant x . Si un espace est muni d'une norme, celle-ci induit une topologie par la définition suivante d'un ouvert : \mathbf{O} est un ouvert si pour chacun de ses éléments x , il existe un boule centrée en x entièrement contenue dans \mathbf{O} .

Nous pouvons alors définir la notion de continuité pour une fonction $f : \mathbf{E} \mapsto \mathbf{F}$ entre deux espaces topologiques \mathbf{E} et \mathbf{F} . f est continue si pour tout ouvert \mathbf{O} de \mathbf{F} , $f^{-1}\{\mathbf{O}\}$ est un ouvert de \mathbf{E} . f est alors appelée une *carte* de \mathbf{E} dans \mathbf{F} . Si la fonction f est bijective, et si f et son inverse sont continues, alors f est un *homéomorphisme* (isomorphisme d'espaces topologiques). Dans ce cas, les espaces \mathbf{E} et \mathbf{F} sont topologiquement équivalents.

A.2 Variété différentiable

Nous allons enrichir la structure d'un espace topologique en introduisant tout d'abord la notion de variété comme des espaces qui ressemblent localement à \mathbb{R}^n . Puis nous verrons comment lisser la structure de cet espace en ajoutant la notion de différentiabilité.

A.2.1 variété topologique

Une *variété topologique* de dimension n , notée \mathcal{V} , est un espace topologique de Hausdorff tel que pour chaque point $p \in \mathcal{V}$ il existe un homéomorphisme $\varphi : \mathbf{O} \mapsto \mathbb{R}^n$ d'un ouvert \mathbf{O} contenant p à un ouvert de \mathbb{R}^n . La paire $\{\mathbf{O}, \varphi\}$ est appelée une *carte*. $\varphi\{p\}$ est un ensemble de n nombres réels, $x^\mu\{p\}$ avec $\mu = 0, 1, \dots, n-1$: ce sont les *coordonnées* du point p dans le domaine \mathbf{O} . En particulier, x^μ (μ fixé) est une application de $\mathbf{O} \mapsto \mathbb{R}$. L'ensemble des cartes $\{\mathbf{O}_\alpha, \varphi_\alpha\}$ nécessaires pour décrire tous les points de la variété, c'est-à-dire telles que $\mathcal{V} = \bigcup_\alpha \mathbf{O}_\alpha$, est un *atlas*. Une seule carte peut être suffisante pour décrire toute la variété, comme pour \mathbb{R}^n muni des coordonnées cartésiennes. Pour la sphère S^2 par contre, au moins deux cartes sont nécessaires. Soient deux cartes, $\{\mathbf{O}_1, \varphi_1\}$ et $\{\mathbf{O}_2, \varphi_2\}$ telles que $\mathbf{I} = \mathbf{O}_1 \cap \mathbf{O}_2 \neq \emptyset$. A un point $p \in \mathbf{I}$, nous pouvons ainsi associer les coordonnées $x^\mu = \varphi_1\{p\}$ ou $\tilde{x}^\mu = \varphi_2\{p\}$. L'application $\varphi_2 \circ \varphi_1^{-1}$ est un homéomorphisme de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R}^n représentant un changement de coordonnées $x^\mu \mapsto \tilde{x}^\mu$. La transformation inverse, $\tilde{x}^\mu \mapsto x^\mu$ s'obtient par l'homéomorphisme $\varphi_1 \circ \varphi_2^{-1}$. Les deux cartes $\{\mathbf{O}_1, \varphi_1\}$ et $\{\mathbf{O}_2, \varphi_2\}$ sont dites C^k compatibles si $\mathbf{I} = \emptyset$ ou si les fonctions $x^\mu\{\tilde{x}^\mu\}$ et $\tilde{x}^\mu\{x^\mu\}$ sont de classe C^k . Un atlas est C^∞ si les cartes sont C^∞ compatibles et cet atlas est *maximal* s'il contient chaque carte qui est C^∞ compatible avec n'importe quelle de ses cartes.

A.2.2 variété différentiable

Soient deux variétés topologiques \mathcal{V}_1 et \mathcal{V}_2 , ϕ est une application différentiable de $\mathcal{V}_1 \mapsto \mathcal{V}_2$ si elle s'exprime localement par une application différentiable de $\mathbb{R}^{n_1} \mapsto \mathbb{R}^{n_2}$. Lorsque $\mathcal{V}_1 = \mathcal{V}_2$, si ϕ est bijective et si son inverse est différentiable alors ϕ est appelée un difféomorphisme. Un difféomorphisme est nécessairement un homéomorphisme (la dérivabilité implique la continuité). Une *variété différentiable* est une variété topologique munie d'un atlas C^∞ maximal. Dans ce cas le changement de cartes est un difféomorphisme local de $\mathcal{V} \mapsto \mathbb{R}^n$. Nous supposons dans la suite que cette variété est orientable, c'est-à-dire que l'atlas contient uniquement des cartes telles que le jacobien dans un changement de coordonnée est positif.

A.3 Définition des tenseurs

Les tenseurs ont été introduits en physique par le cristallographe allemand Woldemar Voigt au XIXème siècle, puis en mathématiques par Lévi-Civita. Nous allons montrer comment définir des espaces vectoriels sur une variété.

A.3.1 espace tangent

Une application $f : \mathcal{V} \mapsto \mathbb{R}$ est de classe C^k si $f \circ \varphi^{-1} : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ est de classe C^k , où φ appartient à une carte $\{\mathbf{O}, \varphi\}$ telle que \mathbf{O} est contenu dans le domaine de f . Cette propriété est indépendante du choix d'une carte lorsque l'atlas est C^k compatible. L'ensemble des applications f de classe C^∞ définie dans un ouvert \mathbf{U} d'un point p dans \mathbb{R} sera noté C_p^∞ . Une application linéaire $X : C_p^\infty \mapsto \mathbb{R}$ est une *dérivation* si elle satisfait la propriété suivante $\forall a, b \in \mathbb{R}$ et $\forall f, g \in C_p^\infty$:

$$X\{af + bg\} = aX\{f\} + bX\{g\}, X\{fg\} = X\{f\}g\{p\} + f\{p\}X\{g\}. \quad (\text{A.1})$$

L'ensemble de ces dérivations forme un espace vectoriel dans \mathbb{R} au point p , appelé *espace vectoriel tangent* $T_p\{\mathcal{V}\}$, avec les lois $\forall a \in \mathbb{R}$ et $\forall X, Y \in T_p\{\mathcal{V}\}$

$$(X + Y)\{f\} = X\{f\} + Y\{f\}, (aX)\{f\} = aX\{f\}. \quad (\text{A.2})$$

Un vecteur de cet espace vérifie en particulier $X\{f\} = 0$ dès lors que la fonction f est une constante réelle. Etant donnée une carte $\{\mathbf{O}, \varphi\}$ associée à des coordonnées x^μ , n'importe quel vecteur de l'espace vectoriel tangent en $p \in \mathbf{O}$ peut s'écrire sous la forme

$$X = X^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \quad X^\mu \equiv X\{x^\mu\}. \quad (\text{A.3})$$

En corollaire, les n dérivées partielles ∂_μ forment une base, appelée la base canonique ou naturelle induite par la carte $\{\mathbf{O}, \varphi\}$, de l'espace vectoriel tangent en chaque point $p \in \mathcal{V}$. Dans un changement de coordonnées, $x^\mu \mapsto \tilde{x}^\mu$, correspondant à un changement entre les cartes $\{\mathbf{O}_1, \varphi_1\}$ et $\{\mathbf{O}_2, \varphi_2\}$, un vecteur $X \in T_p\{\mathcal{V}\}$ pour $p \in \mathbf{O}_1 \cap \mathbf{O}_2$, se transforme par les propriétés des dérivées partielles comme

$$\tilde{X}^\mu = \frac{\partial \tilde{x}^\mu}{\partial x^\nu} X^\nu, \quad (\text{A.4})$$

en écrivant que

$$X = X^\mu \partial_\mu = \tilde{X}^\nu \tilde{\partial}_\nu. \quad (\text{A.5})$$

L'ensemble des X^μ forme les composantes *contravariantes* du vecteur X .

A.3.2 espace cotangent

L'espace vectoriel cotangent en un point $p \in \mathcal{V}$, noté $T_p^*\{\mathcal{V}\}$, est l'espace dual de l'espace tangent, c'est-à-dire l'ensemble des formes linéaires $\omega : T_p\{\mathcal{V}\} \mapsto \mathbb{R}$, qui à un vecteur $X \in T_p\{\mathcal{V}\}$ associe un nombre réel noté $\omega\{X\} = \langle \omega, X \rangle$. Pour chaque fonction $f \in C_p^\infty$, il existe un unique élément $df \in T_p^*\{\mathcal{V}\}$ tel que $\forall X \in T_p\{\mathcal{V}\}$

$$\langle df, X \rangle \equiv X\{f\}. \quad (\text{A.6})$$

En particulier, en remplaçant X par le vecteur coordonnée ∂_μ nous avons

$$\langle df, \partial_\mu \rangle = \partial_\mu f. \quad (\text{A.7})$$

Par ailleurs, en remplaçant f par x^μ comme une fonction qui à un point p de la variété fournit la coordonnée d'indice μ , nous avons une seconde propriété importante

$$\langle dx^\mu, X \rangle = X\{x^\mu\} = X^\mu, \quad (\text{A.8})$$

d'où avec $X = \partial_\nu$

$$\langle dx^\mu, \partial_\nu \rangle = \delta_\nu^\mu. \quad (\text{A.9})$$

L'ensemble des formes linéaires dx^μ constituent donc une base de l'espace vectoriel cotangent $T_p^*\{\mathcal{V}\}$. Par conséquent n'importe quelle forme $\omega \in T_p^*\{\mathcal{V}\}$ se décompose sur cette base $\omega = \omega_\mu dx^\mu$ et lorsque $\omega = df$ nous retrouvons la différentielle d'une fonction $df = \partial_\mu f dx^\mu$. Nous voyons immédiatement que dans un changement de coordonnées $x^\mu \mapsto \tilde{x}^\mu$, la différentielle se transforme comme

$$d\tilde{x}^\mu = \partial_\nu \tilde{x}^\mu dx^\nu. \quad (\text{A.10})$$

Une forme (covecteur) ω se transforme alors comme

$$\tilde{\omega}_\mu = \frac{\partial x^\nu}{\partial \tilde{x}^\mu} \omega_\nu. \quad (\text{A.11})$$

L'ensemble des ω_μ sont appelées les composantes *covariantes* de ω parce qu'elles se transforment comme les coordonnées x^μ dans un changement de carte. De par la linéarité, un vecteur $X \in T_p\{\mathcal{V}\}$ peut aussi être interprété comme une forme linéaire dans l'espace cotangent $T_p^*\{\mathcal{V}\}$, avec $\forall \omega \in T_p^*\{\mathcal{V}\}$, $X\{\omega\} \equiv \langle \omega, \vec{X} \rangle$.

A.3.3 tenseurs d'ordre quelconque

Le produit tensoriel entre deux vecteurs ω et Ω en un point p dans $T_p^*\{\mathcal{V}\}$ est défini par l'application bilinéaire $\omega \otimes \Omega : T_p\{\mathcal{V}\} \times T_p\{\mathcal{V}\} \mapsto \mathbb{R}$ telle que $\forall X, Y \in T_p\{\mathcal{V}\}$

$$\omega \otimes \Omega\{X, Y\} \equiv \omega\{X\}\Omega\{Y\}. \quad (\text{A.12})$$

Puisque des vecteurs X et Y de l'espace tangent peuvent être vus comme des forme linéaires dans l'espace dual, nous pouvons également définir une application bilinéaire $X \otimes Y : T_p^*\{\mathcal{V}\} \times T_p^*\{\mathcal{V}\} \mapsto \mathbb{R}$ telle que $\forall \omega, \Omega \in T_p^*\{\mathcal{V}\}$

$$X \otimes Y\{\omega, \Omega\} \equiv X\{\omega\}Y\{\Omega\}. \quad (\text{A.13})$$

Enfin, une application bilinéaire $X \otimes \omega : T_p\{\mathcal{V}\} \times T_p\{\mathcal{V}\} \mapsto \mathbb{R}$ entre un vecteur X et un covecteur ω est définie par $\forall \Omega \in T_p^*\{\mathcal{V}\}$ et $\forall Y \in T_p\{\mathcal{V}\}$:

$$X \otimes \omega\{\Omega, Y\} \equiv X\{\Omega\}\omega\{Y\}. \quad (\text{A.14})$$

Plus généralement, nous pouvons ainsi construire des applications multilinéaires dans \mathbb{R} de r vecteurs et s covecteurs au même point $p \in \mathcal{V}$. L'ensemble de toutes ces applications, noté $(T_p^*\{\mathcal{V}\})^r \otimes (T_p\{\mathcal{V}\})^s$ est un espace vectoriel avec pour lois, l'addition et la

multiplication. Un élément de cet espace est appelé un *tenseur* r fois covariant et s fois contravariant. Soient $\{e_{(\mu)}\}$ une base de l'espace tangent et $\{e^{(\mu)}\}$ la base duale, l'ensemble des produits tensoriels

$$e^{(\mu_1)} \otimes \dots \otimes e^{(\mu_r)} \otimes e_{(\nu_1)} \otimes \dots \otimes e_{(\nu_s)} \quad (\text{A.15})$$

forme une base de l'espace vectoriel des tenseurs r fois covariants et s fois contravariants. Un tenseur T quelconque de cet espace se décompose ainsi

$$T = T_{\mu_1 \dots \mu_r}^{\nu_1 \dots \nu_s} e^{(\mu_1)} \otimes \dots \otimes e^{(\mu_r)} \otimes e_{(\nu_1)} \otimes \dots \otimes e_{(\nu_s)}, \quad (\text{A.16})$$

où $T_{\mu_1 \dots \mu_r}^{\nu_1 \dots \nu_s}$ sont les composantes du tenseur définies par

$$T_{\mu_1 \dots \mu_r}^{\nu_1 \dots \nu_s} \equiv T\{e^{(\mu_1)}, \dots, e^{(\mu_r)}, e_{(\nu_1)}, \dots, e_{(\nu_s)}\}. \quad (\text{A.17})$$

Dans un changement de coordonnées, un tenseur se transforme comme

$$\tilde{T}_{\mu_1 \dots \mu_r}^{\nu_1 \dots \nu_s} = \frac{\partial \tilde{x}^{\nu_1}}{\partial x^{\rho_1}} \dots \frac{\partial \tilde{x}^{\nu_s}}{\partial x^{\rho_s}} \frac{\partial x^{\sigma_1}}{\partial \tilde{x}^{\mu_1}} \dots \frac{\partial x^{\sigma_r}}{\partial \tilde{x}^{\mu_r}} T_{\sigma_1 \dots \sigma_r}^{\rho_1 \dots \rho_s}. \quad (\text{A.18})$$

A.3.4 champs tensoriels

L'union des espaces tangents pour tous les points de la variété est appelée le *fibré* tangent, noté $T\{\mathcal{V}\}$. Un élément de cet ensemble est la donnée d'un point $p \in \mathcal{V}$ et d'un vecteur $X \in T_p\{\mathcal{V}\}$. Le fibré tangent n'est donc pas un espace vectoriel parce que l'addition de vecteurs appartenant à des espaces tangents différents n'a pas de sens. En revanche l'ensemble des *champs* vectoriels (dont un élément est la donnée d'un vecteur pour *tous* les points de la variété) est un espace vectoriel de dimension infinie. Cet espace peut être muni d'une algèbre en lui adjoignant une loi supplémentaire de multiplication entre vecteurs. Le simple produit XY de champs vectoriels n'est pas une dérivation et n'appartient donc pas au même espace. En effet, $\forall f, g \in C_p^\infty$

$$X\{Y\{fg\}\} = X\{Y\{f\}g + fY\{g\}\} = X\{Y\{f\}\}g + Y\{f\}X\{g\} + Y\{g\}X\{f\} + fX\{Y\{g\}\} \quad (\text{A.19})$$

en remarquant que $\forall f \in C_p^\infty$, $X\{f\} \in C_p^\infty$ puisque X est un champ. En revanche, le crochet de Lie défini par le commutateur

$$[X, Y] \equiv XY - YX, \quad (\text{A.20})$$

est un champ vectoriel puisqu'il satisfait la propriété de dérivation énoncée précédemment

$$[X, Y]\{fg\} = [X, Y]\{f\}g + f[X, Y]\{g\}. \quad (\text{A.21})$$

Le crochet est une application bilinéaire, antisymétrique

$$[X, Y] = -[Y, X], \quad (\text{A.22})$$

et vérifiant l'identité de Jacobi

$$[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0. \quad (\text{A.23})$$

L'algèbre associée est donc une algèbre de Lie.

De la même façon, est défini le fibré cotangent $T^*\{\mathcal{V}\}$ comme l'ensemble des formes linéaires et l'espace vectoriel des champs de formes sur la variété. Plus généralement, nous pouvons ainsi introduire des champs de tenseurs définis sur toute la variété \mathcal{V} .

A.4 Applications linéaires tangentés et cotangentés

Une application $f : \mathcal{M} \mapsto \mathcal{N}$ différentiable induit une application linéaire tangente (en anglais *pushforward*), notée $f_* : T_p\{\mathcal{M}\} \mapsto T_{f\{p\}}\{\mathcal{N}\}$ définie dans la base naturelle ∂_μ en $p \in \mathcal{M}$ et ∂_α en $f\{p\} \in \mathcal{N}$ par

$$Y^\alpha = \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^\mu} X^\mu, \quad (\text{A.24})$$

où $Y \in T_{f\{p\}}\{\mathcal{N}\}$ et $X \in T_p\{\mathcal{M}\}$. Y est appelée l'image directe de X , notée $Y = f_*\{X\}$. Nous pouvons ainsi transporter des tenseurs contravariants de la variété \mathcal{M} sur la variété \mathcal{N} . Nous pouvons également ramener des formes (et par suite des tenseurs covariants) de la variété \mathcal{N} sur la variété \mathcal{M} par l'application linéaire cotangente (en anglais *pullback*) notée $f^* : T_{f\{p\}}^*\{\mathcal{N}\} \mapsto T_p^*\{\mathcal{M}\}$ définie par $\omega = f^*\{\Omega\}$ avec

$$\omega_\mu = \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^\mu} \Omega_\alpha, \quad (\text{A.25})$$

$\omega \in T_p^*\{\mathcal{M}\}$ et $\Omega \in T_{f\{p\}}^*\{\mathcal{N}\}$.

A.5 Formes différentielles et algèbre extérieure

Un tenseur T , 2-fois covariant, antisymétrique dans l'échange de ses deux arguments, à savoir $\forall X, Y \in T_p\{\mathcal{V}\}$,

$$T\{X, Y\} = -T\{Y, X\}, \quad (\text{A.26})$$

est appelé une 2-forme. Plus généralement, un tenseur k -fois covariant totalement antisymétrique est une k -forme et sera noté $\underline{\omega}$. Un tel tenseur a la propriété d'être égal à sa projection alternée $\text{Alt}\{\underline{\omega}\}$ définie par

$$\text{Alt}\{\underline{\omega}\}_{\mu_1 \dots \mu_k} \equiv \omega_{[\mu_1 \dots \mu_k]} \equiv \frac{1}{k!} \sum_{\sigma \in S_k} \text{sign}\{\sigma\} \omega_{\mu_{\sigma\{1\}} \dots \mu_{\sigma\{k\}}}, \quad (\text{A.27})$$

où S_k est le groupe de permutation de k éléments et $\text{sign}\{\sigma\}$ la signature de la permutation σ (celle-ci est égale à 1 si la permutation contient un nombre paire de transpositions c'est-à-dire d'échanges de deux éléments, -1 sinon). Une k -forme dont $k > n$ est nécessairement nulle. Un covecteur est par définition une 1-forme, aussi appelée « forme pfaffienne ». L'ensemble des k -formes est un sous espace vectoriel de l'espace des tenseurs k -fois covariants, noté $\Lambda^k\{T_p\{\mathcal{V}\}\}$, de dimension $n!/k!(n-k)!$.

A.5.1 Produit extérieur

Le *produit extérieur* d'une k -forme $\underline{\omega} \in \Lambda^k\{T_p\{\mathcal{V}\}\}$, et d'une q -forme $\underline{\Omega} \in \Lambda^q\{T_p\{\mathcal{V}\}\}$ est défini par

$$\underline{\omega} \wedge \underline{\Omega} \equiv \frac{(k+q)!}{k!q!} \text{Alt}\{\underline{\omega} \otimes \underline{\Omega}\}, \quad (\text{A.28})$$

ou en composantes

$$(\underline{\omega} \wedge \underline{\Omega})_{\mu_1 \dots \mu_k \mu_{k+1} \dots \mu_{k+q}} \equiv \frac{(k+q)!}{k!q!} \omega_{[\mu_1 \dots \mu_k} \Omega_{\mu_{k+1} \dots \mu_{k+q}]}. \quad (\text{A.29})$$

Le produit extérieur est associatif, distributif et satisfait la propriété d'anticommutativité

$$\underline{\omega} \wedge \underline{\Omega} = (-1)^{kq} \underline{\Omega} \wedge \underline{\omega}. \quad (\text{A.30})$$

Avec le choix de normalisation, nous avons également la propriété suivante : $\forall X_1 \dots X_k \in T_p\{\mathcal{V}\}$ et $\forall \omega^1 \dots \omega^k \in T_p^*\{\mathcal{V}\}$

$$\omega^1 \wedge \dots \wedge \omega^k \{X_1, \dots, X_k\} = \det\{\omega^j \{X_i\}\}, \quad (\text{A.31})$$

où $\det\{\omega^i \{X_j\}\}$ est le déterminant de la matrice dont l'élément de la i -ème ligne et de la j -ième colonne est $\omega^i \{X_j\}$. En particulier, dans la base naturelle associée à des coordonnées x^μ , nous avons d'après la formule précédente

$$dx^1 \wedge \dots \wedge dx^n \{\partial_1, \dots, \partial_n\} = \det\{dx^j \{\partial_i\}\} = \det\{\delta_i^j\} = 1. \quad (\text{A.32})$$

Le produit extérieur forme une algèbre, l'algèbre de Grassman, pour l'espace $\Lambda\{T_p\{\mathcal{V}\}\}$ défini par la somme directe $\Lambda\{T_p\{\mathcal{V}\}\} \equiv \Lambda^0\{T_p\{\mathcal{V}\}\} \oplus \dots \oplus \Lambda^n\{T_p\{\mathcal{V}\}\}$. La dimension de $\Lambda\{T_p\{\mathcal{V}\}\}$ est donnée par

$$\dim\{\Lambda\{T_p\{\mathcal{V}\}\}\} = \sum_{k=0}^n \dim\{\Lambda^k\{T_p\{\mathcal{V}\}\}\} = 2^n. \quad (\text{A.33})$$

Etant données des coordonnées x^μ , l'ensemble *ordonné* des produits extérieurs $dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_k}$ avec $\mu_1 < \dots < \mu_k$ forme une base de $\Lambda^k\{T_p\{\mathcal{V}\}\}$. N'importe quelle k -forme $\underline{\omega}$ se décompose donc sur cette base comme

$$\underline{\omega} = \omega_{\mu_1 \dots \mu_k} dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_k}, \quad \mu_1 < \dots < \mu_k. \quad (\text{A.34})$$

Nous pouvons également écrire la forme $\underline{\omega}$ sans ordonner les produits extérieurs (dans ce cas l'ensemble des produits extérieurs des formes dx^μ n'est plus une base, mais seulement une famille génératrice)

$$\underline{\omega} = \frac{1}{k!} \omega_{\mu_1 \dots \mu_k} dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_k}. \quad (\text{A.35})$$

La k -forme $\underline{\omega}$ peut également être vue comme un tenseur k -fois covariant et s'écrire comme

$$\underline{\omega} = \omega_{\mu_1 \dots \mu_k} dx^{\mu_1} \otimes \dots \otimes dx^{\mu_k}. \quad (\text{A.36})$$

Dans la suite, les composantes seront toujours évaluées par rapport à la base tensorielle.

A.5.2 Dérivée extérieure

La notion de *dérivée extérieure* est une généralisation pour une variété, de la différentielle d'une fonction (0-forme). La dérivée extérieure d'une k-forme est l'unique application notée ∂ de $\Lambda^k\{T_p\{\mathcal{V}\}\} \mapsto \Lambda^{(k+1)}\{T_p\{\mathcal{V}\}\}$ telle que $\partial^2 = 0$ et

$$\partial\{\underline{\omega} \wedge \underline{\Omega}\} = \partial\underline{\omega} \wedge \underline{\Omega} + (-1)^{k_1} \underline{\omega} \wedge \partial\underline{\Omega}. \quad (\text{A.37})$$

La dérivée extérieure d'une k-forme $\underline{\omega}$ est donnée en composantes par

$$(\partial\underline{\omega})_{\mu_1 \dots \mu_{k+1}} \equiv (k+1) \partial_{[\mu_1} \omega_{\mu_2 \dots \mu_{k+1}]}. \quad (\text{A.38})$$

Par exemple la dérivée extérieure d'une 0-forme f est une 1-forme df dont les composantes sont simplement $\partial_\mu f$. Autrement dit $df = \partial_\mu f dx^\mu$ est bien la différentielle de f . La propriété de la dérivée extérieure $\partial\partial\underline{\omega} = 0$ porte le nom de propriété de fermeture de Poincaré. La réciproque, à savoir que $\partial\underline{\Omega} = 0$ implique l'existence d'une forme $\underline{\omega}$ telle que $\underline{\Omega} = \partial\underline{\omega}$, est seulement localement vraie (l'extension à tout l'espace dépend de sa topologie, pour \mathbb{R}^4 par exemple, cette propriété est vraie globalement). La notion de dérivée extérieure est indépendante de la connexion (symétrique) du fait de l'antisymétrisation, et par conséquent la dérivée covariante si jamais elle est définie peut remplacer la simple dérivée partielle dans la définition.

A.5.3 Dérivée de Lie

La dérivée de Lie est une généralisation de la dérivée d'une fonction de $\mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$. Lorsque nous considérons une fonction $f : \mathcal{V} \mapsto \mathbb{R}$ définie sur une variété à plusieurs dimensions, la question se pose de savoir comment varie cette fonction pour un déplacement dans une direction donnée. La dérivée de Lie le long d'un champ de vecteur X d'une telle fonction f est définie par

$$\vec{X} \mathcal{L} f \equiv X\{f\}. \quad (\text{A.39})$$

Plus généralement, la dérivée de Lie d'un champ de tenseur le long d'un champ de vecteur X est un champ de tenseur de même ordre qui est une dérivation pour l'algèbre tensorielle : quels que soient les tenseurs t_1 et t_2

$$\vec{X} \mathcal{L}\{t_1 \otimes t_2\} = (\vec{X} \mathcal{L} t_1) \otimes t_2 + t_1 \otimes (\vec{X} \mathcal{L} t_2). \quad (\text{A.40})$$

Pour compléter la définition de la dérivée de Lie, il suffit de spécifier son action sur les vecteurs et les formes. La dérivée de Lie d'un vecteur Y est donnée par le crochet de Lie

$$\vec{X} \mathcal{L} Y \equiv [X, Y], \quad (\text{A.41})$$

et la dérivée de Lie d'une 1-forme $\underline{\omega}$ est donnée par

$$\vec{X} \mathcal{L} \underline{\omega} \equiv X\{\underline{\omega}\{Y\}\} - \underline{\omega}\{[X, Y]\}. \quad (\text{A.42})$$

En coordonnées, la dérivée de Lie d'un tenseur $T_{\nu_1 \dots \nu_q}^{\mu_1 \dots \mu_p}$ est donnée par la formule

$$(\vec{X} \mathcal{L} T)_{\nu_1 \dots \nu_q}^{\mu_1 \dots \mu_p} = X^\rho \partial_\rho T_{\nu_1 \dots \nu_q}^{\mu_1 \dots \mu_p} - T_{\nu_1 \dots \nu_q}^{\rho \dots \mu_p} \partial_\rho X^{\mu_1} - \dots - T_{\nu_1 \dots \nu_q}^{\mu_1 \dots \rho} \partial_\rho X^{\mu_p} + T_{\rho \dots \nu_q}^{\mu_1 \dots \mu_p} \partial_{\nu_1} X^\rho + \dots + T_{\nu_1 \dots \rho}^{\mu_1 \dots \mu_p} \partial_{\nu_q} X^\rho. \quad (\text{A.43})$$

Contrairement à la dérivée extérieure, la dérivée de Lie est une dérivation pour l'algèbre extérieure :

$$\vec{X} \mathcal{L} \{\underline{\omega} \wedge \underline{\Omega}\} = \vec{X} \mathcal{L} \{\underline{\omega}\} \wedge \underline{\Omega} + \underline{\omega} \wedge \vec{X} \mathcal{L} \{\underline{\Omega}\}. \quad (\text{A.44})$$

La dérivée de Lie d'une k-forme $\underline{\omega}$ est donnée par la formule de Cartan

$$\vec{X} \mathcal{L} \underline{\omega} = \vec{X} \cdot (\partial \underline{\omega}) + \partial \{\vec{X} \cdot \underline{\omega}\}, \quad (\text{A.45})$$

où le point \cdot indique une contraction des indices. Notons enfin que la dérivée de Lie commute avec la dérivée extérieure.

A.5.4 Intégration de formes différentielles

Considérons tout d'abord l'intégration d'une n-forme dans \mathbb{R}^n . L'espace des n-formes est un espace vectoriel de dimension 1 avec pour seul vecteur de base $dx^1 \wedge \dots \wedge dx^n$. Par conséquent, une n-forme $\underline{\omega}$ peut se décomposer comme $\underline{\omega} = f\{x\} dx^1 \wedge \dots \wedge dx^n$, où $f \in C^\infty\{\mathbb{R}^n\}$. Nous supposons de plus que f est à support compact. L'intégrale de la n-forme est alors identifiée à l'intégrale de Riemann

$$\int_{\mathbb{R}^n} f\{x\} d^n x. \quad (\text{A.46})$$

Il faut cependant prendre garde d'identifier $d^n x$ avec $dx^1 \wedge \dots \wedge dx^n$ puisque ce dernier dépend du choix d'une orientation.

L'intégration d'une q-forme $\underline{\omega}$ sur une surface de dimension q est bien définie. L'élément de surface infinitésimal (de dimension q) est un *q-vecteur* c'est-à-dire un tenseur q-fois contravariant complètement antisymétrique, noté $d\vec{S}$, donné par le produit extérieur des déplacements infinitésimaux $d\vec{x}_{(i)}$ ou en composantes $dx_{(i)}^\mu$ avec $i = 1 \dots q$ et $\mu = 0 \dots n-1$ (n étant la dimension de la variété)

$$d\vec{S} = d\vec{x}_{(1)} \wedge \dots \wedge d\vec{x}_{(q)}. \quad (\text{A.47})$$

L'intégrale d'une q-forme $\underline{\omega}$ sur la surface est définie par la formule

$$\int d\vec{S} \rfloor \underline{\omega} \quad (\text{A.48})$$

où nous avons introduit le produit intérieur par la contraction du q-vecteur et de la q-forme

$$d\vec{S} \rfloor \underline{\omega} \equiv \frac{1}{q!} dS^{\mu_1 \dots \mu_q} \omega_{\mu_1 \dots \mu_q}. \quad (\text{A.49})$$

Le théorème de Stokes se généralise aux formes différentielles. Ainsi l'intégrale d'une q-forme $\underline{\omega}$ sur une surface fermée contenant un volume Σ de dimension q+1, est donnée par

$$\oint_{\partial \Sigma} d\vec{S} \rfloor \underline{\omega} = \int_{\Sigma} d\vec{\Sigma} \rfloor \partial \underline{\omega}. \quad (\text{A.50})$$

A.6 Connexion et dérivée covariante

Par définition, une connexion sur la variété est une carte, qui à deux champs de vecteurs X et Y associe le champ noté $\nabla_X Y$ tel que $\forall f, g \in C_p^\infty$

$$\nabla_{fX+gY} = f\nabla_X + g\nabla_Y \quad (\text{A.51})$$

$$\nabla_X \{fY\} = X\{f\}Y + f\nabla_X Y. \quad (\text{A.52})$$

$$\nabla_X \{f\} = X\{f\}. \quad (\text{A.53})$$

Comme la connexion est un vecteur, il peut s'exprimer comme une combinaison linéaire de vecteurs de base $\{e_{(\mu)}\}$ de l'espace tangent en un point p de la variété donc

$$\nabla_X e_{(\mu)} = \omega_\mu^\nu \{X\} e_{(\nu)}, \quad (\text{A.54})$$

avec $\omega_\mu^\nu \{X\} \in \mathbb{R}$. En posant $X = X^\mu \partial_\mu$ et $Y = Y^\nu \partial_\nu$ il vient

$$\nabla_X Y = (X\{Y^\mu\} + Y^\nu \omega_\nu^\mu \{X\}) e_{(\nu)}. \quad (\text{A.55})$$

Par linéarité, $\omega_\mu^\nu \{X\} = X^\rho \omega_\nu^\mu \{e_{(\rho)}\}$ (donc ω_μ^ν est une 1-forme) d'où

$$\nabla_X Y = (X\{Y^\mu\} + Y^\nu X^\rho \omega_\nu^\mu \{e_{(\rho)}\}) e_{(\mu)}. \quad (\text{A.56})$$

Dans la base naturelle $\{\partial_\mu\}$, en développant la 1-forme ω_ν^μ sur la base duale $\omega_\nu^\mu = \Gamma_{\nu\rho}^\mu dx^\rho$, la connexion s'exprime sous la forme

$$\nabla_X Y = X^\rho (\nabla_\rho Y^\mu) e_{(\mu)}, \quad (\text{A.57})$$

où $\nabla_\rho Y^\mu$ sont les composantes de la dérivée covariante du vecteur Y définie par

$$\nabla_\rho Y^\mu = \partial_\rho Y^\mu + \Gamma_{\nu\rho}^\mu Y^\nu. \quad (\text{A.58})$$

La connexion permet de comparer des vecteurs en différents points de la variété en postulant que la variation dX d'un vecteur X entre les points de coordonnées x^μ et $x^\mu + dx^\mu$ est donnée par

$$dX^\mu = (\nabla_\nu X^\mu) dx^\nu. \quad (\text{A.59})$$

La dérivée covariante d'une forme $\underline{\omega}$ est définie par

$$\nabla_\rho \omega_\mu = \partial_\rho \omega_\mu - \Gamma_{\rho\mu}^\nu \omega_\nu. \quad (\text{A.60})$$

La dérivée covariante se généralise à des tenseurs d'ordre quelconque.

Contrairement à la dérivée de Lie, la dérivée covariante modifie le rang d'un tenseur et nécessite l'introduction d'une structure supplémentaire dans l'espace-temps, à savoir une connexion. La notion de courbure de l'espace-temps est liée à la spécification d'une connexion. Pour une connexion ∇ donnée, les tenseurs de torsion T et de courbure K sont définis par $\forall X, Y, Z \in T\{\mathcal{V}\}$

$$T\{X, Y\} = \nabla_X Y - \nabla_Y X - [X, Y], \quad (\text{A.61})$$

$$K\{X, Y\}Z = (\nabla_X \nabla_Y - \nabla_Y \nabla_X - \nabla_{[X, Y]}). \quad (\text{A.62})$$

Lorsque la variété est munie d'une métrique g comme en relativité générale, il est possible de définir une unique connexion, la connexion de Lévi-Civita, par la condition que la torsion associée soit nulle et que la dérivée covariante de la métrique soit nulle. Les composantes de la connexion sont symétriques $\Gamma_{\mu\nu}^\rho = \Gamma_{\nu\mu}^\rho$ et s'expriment par les symboles de Christoffel

$$\Gamma_{\mu\nu}^\rho = \frac{1}{2}g^{\rho\sigma}(\partial_\mu g_{\nu\sigma} + \partial_\nu g_{\mu\sigma} - \partial_\sigma g_{\mu\nu}). \quad (\text{A.63})$$

Appendice B

Masses effectives dans les couches profondes

Sommaire

B.1 Noyaux ou bulles sphériques	337
B.2 Noyaux exotiques	337

Nous avons résumé dans cette annexe les résultats numériques concernant les couches profondes de l'écorce interne. Les neutrons ont été décrits par le modèle de Oyamatsu & Yamada (1994) présenté dans le chapitre 11.

B.1 Noyaux ou bulles sphériques

Les noyaux sphériques et sont disposés dans un réseau cubique centré.

n_b (fm ⁻³)	n_n (fm ⁻³)	n_f/n_n	m_*/m_n
0.03	0.029	0.94	15.4
0.055	0.053	0.95	5.5
0.0855	0.0826	0.98	1.07

B.2 Noyaux exotiques

Les noyaux adoptent des formes exotiques : cylindres (réseau hexagonal), plans et tubes (réseau hexagonal).

B.2.1 cylindres

n_b (fm ⁻³)	n_n (fm ⁻³)	n_f/n_n	m_\star^\perp/m_n
0.06	0.0581	0.9553	1.347
0.065	0.063	0.9578	1.242
0.07	0.0678	0.9606	1.174
0.074	0.0716	0.9633	1.124

B.2.2 plans

n_b (fm ⁻³)	n_n (fm ⁻³)	n_f/n_n	m_\star^\perp/m_n
0.076	0.0735	0.9634	1.031
0.0775	0.0749	0.9646	1.029
0.08	0.0773	0.9666	1.025
0.082	0.0792	0.9687	1.020

B.2.3 tubes

n_b (fm ⁻³)	n_n (fm ⁻³)	n_f/n_n	m_\star^\perp/m_n
0.083	0.0802	0.9734	1.010
0.084	0.0811	0.9746	1.003
0.085	0.0821	0.9762	1.001

Appendice C

Paramétrisation des forces de Skyrme

Nous avons reproduit ci-dessous les paramètres de quelques forces de Skyrme.

C.1 SLy4

t_0	-2488.91
t_1	486.82
t_2	-546.39
t_3	13777
x_0	0.834
x_1	-0.3438
x_2	-1
x_3	1.354
W_0	123
γ	1/6

C.2 RATP

t_0	-2160
t_1	513
t_2	121
t_3	11600
x_0	0.418
x_1	-0.36
x_2	-2.29
x_3	0.586
W_0	120
γ	1/5

C.3 SkM*

t_0	-2645
t_1	410
t_2	-135
t_3	15595
x_0	0.09
x_1	0
x_2	0
x_3	0
W_0	130
γ	1/6

C.4 SGII

t_0	-2645
t_1	340
t_2	-41.9
t_3	15595
x_0	0.09
x_1	-0.059
x_2	1.425
x_3	0.06
W_0	105
γ	1/6

C.5 SII

t_0	-1169.9
t_1	585.6
t_2	-27.1
t_3	9331.1
x_0	0.34
x_1	0
x_2	0
x_3	0
W_0	105
γ	1

Liste des tableaux

Étoiles à neutrons

1.1	Equations d'états	9
1.2	Quelques ordres de grandeurs concernant les étoiles à neutrons typiques (pulsars)	18

Modèle à deux fluides pour une étoile à neutrons

5.1	Échelles caractéristiques	122
-----	-------------------------------------	-----

Théories des bandes

7.1	Schéma d'une table de caractères	165
7.2	Table de caractère du groupe C_i	168
7.3	Singularité de Van Hove du cubium	198

Méthodes numériques

10.1	Poids pour la méthode de GR avec un réseau cubique simple	263
10.2	Poids pour la méthode de GR avec un réseau cubique centré	264
10.3	Poids pour la méthode de GR avec un réseau cubique à faces centrées	264

Résultats

11.1	Rayon maximal dans la méthode des ondes planes augmentées	273
11.2	Table de caractères du groupe O_h dans les notations de Mülliken.	274
11.3	Table de caractères du groupe C_{2v} dans les notations de Mülliken.	275
11.4	Paramètres du modèle de goutte liquide compressible	275
11.5	Champ moyen et masse effective de Skyrme	276
11.6	Correspondance entre différentes définitions de la constante de réseau	291
11.7	Table de caractère de C_i	295
11.8	Table de caractères du groupe C_{4v} dans les notations de Mülliken.	299
11.9	Table de caractères du groupe C_{6v} dans les notations de Mülliken	299

Table des figures

Étoiles à neutrons

1.1	Test de la relativité générale	7
1.2	Masses de quelques étoiles à neutrons	7
1.3	Relation masse-densité centrale d'une étoile à neutron pour différentes équations d'états	10
1.4	Diagramme de phases d'un ensemble homogène d'électrons	12
1.5	Observation par le télescope spatial Hubble d'une étoile à neutrons isolée .	15
1.6	Schéma de la structure d'une étoile à neutrons	17

Pulsars

2.1	Diagramme $P - \dot{P}$	21
2.2	Dispersion du signal d'un pulsar	22
2.3	Profil moyen des signaux d'un pulsar	23
2.4	Exemple de saut de fréquence observé dans le pulsar du Crabe	29
2.5	Amplitudes d'une centaine de sauts de fréquence	29

Formulation covariante de l'espace-temps newtonien

3.1	Elie Cartan	43
3.2	Feuilletage de l'espace-temps newtonien	53
3.3	Edward Arthur Milne	54

Hydrodynamique d'un mélange de fluides non relativistes

4.1	Déplacement des trajectoires des particules	61
4.2	Transport de Lie et transport parallèle	65
4.3	Exemple de tubes de tourbillons observés dans la nature	72
4.4	Schéma représentant deux tubes de vorticités entrelacés	73
4.5	Convention pour la signature d'un noeuds	73
4.6	Représentation schématique de la 2-surface balayée par un tourbillon . . .	77
4.7	<i>Rotorship</i> de l'ingénieur Anton Flettner	107
4.8	Turbovoile de l'équipe Cousteau	108
4.9	Théorème du viriel comme test dans les simulations numériques	117

Théorie des bandes

7.1	Composition de l'écorce d'une étoile à neutrons	154
7.2	Cristaux photoniques	155
7.3	Cristaux phononiques	156
7.4	Félix Bloch	156
7.5	René Just Haüy	171
7.6	Première zone de Brillouin des réseaux cubiques	178
7.7	Surfaces de Fermi	192
7.8	Plans de symétrie et énergies	194
7.9	Singularités de Van Hove	198
7.10	Surfaces de Fermi du cubium	199

Approximation Hartree-Fock

8.1	Wigner et Seitz	209
8.2	Approximation de Wigner-Seitz	211

Evaluation des coefficients d'entraînement

9.1	Déplacement uniforme de la surface de Fermi	224
9.2	Masse effective dans la matière pure de neutrons	230
9.3	Masse effective de neutron dans la matière nucléaire asymétrique	230
9.4	Importance des différentes contribution au champ moyen dans la matière pure de neutrons	231

Méthodes numériques

10.1	Décomposition de la cellule de W-S en deux régions	244
10.2	Position des points moyens de Baldereschi	254
10.3	Test de la méthode des points spéciaux	256
10.4	Test de la méthode de lissage	256
10.5	Domaines irréductibles des réseaux cubiques	260
10.6	Poids dans la méthode de GR	263
10.7	Test de la méthode de Gilat-Raubenheimer	267

Résultats

11.1	Schéma illustrant les profils de densité dans le modèle de goutte liquide	272
11.2	Structure de bandes pour les neutrons de conduction à l'interface entre écorces externe et interne	276
11.3	Test de la validité du modèle de goutte liquide	277
11.4	Fonction de lissage du modèle de goutte liquide	278
11.5	Coefficient de mobilité à très basse densité de neutrons de conduction	279
11.6	Masse effective à l'interface entre écorces externe et interne (structure cubique centrée)	279

11.7 Aire de la surface de Fermi à l'interface entre écorces externe et interne (structure cubique centrée)	280
11.8 Représentation schématique des déformations et déchirures de la surface de Fermi	281
11.9 Surface de Fermi d'aire nulle	281
11.10 Convergence de la méthode de GR pour le calcul de la masse effective . . .	282
11.11 Convergence de la méthode de GR pour le calcul de la surface de Fermi . .	283
11.12 Densité d'états à l'interface entre écorces externe et interne (structure cubique centrée)	284
11.13 Masse effective et effets de couches	285
11.14 Masse effective et effets de surface	285
11.15 Masse effective à l'interface entre écorces externe et interne (structure cubique simple)	286
11.16 Masse effective à l'interface entre écorces externe et interne (structure cubique à faces centrées)	286
11.17 Schéma des phases exotiques dans l'écorce d'une étoile à neutrons	287
11.18 Potentiel central et couplage spin-orbit	291
11.19 Première zone de Brillouin d'une chaîne linéaire	293
11.20 Première zone de Brillouin des réseaux carrés et hexagonal	297
11.21 Masse effective des neutrons dans une écorce de noyaux sphériques à haute densité	300
11.22 Masse effective transverse des neutrons dans les phases exotiques de l'écorce	300
11.23 Convergence du calcul de la masse effective à haute densité	301
11.24 Convergence du calcul de la masse effective transverse à deux dimensions .	302
11.25 Aire de la surface de Fermi	302
11.26 Convergence du calcul de l'aire de la surface de Fermi	303
11.27 Aire de la surface de Fermi dans les phases exotiques	303
11.28 Structure de bandes des neutrons pour des noyaux cylindriques	307
11.29 Mise en évidence du couplage spin-orbit	307
11.30 Evolution schématique de la masse effective dans l'écorce interne	308
11.31 Densité de neutrons autocohérente	313
11.32 Densité cinétique autocohérente	313
11.33 Masse effective de Skyrme autocohérente	314
11.34 Champ moyen de Skyrme autocohérent	314
11.35 Coefficients d'entraînement sans dimension	316

Bibliographie

- Akmal, A., Pandharipande, V. R., Ravenhall, D. G., Equation of state of nucleon matter and neutron star structure, *Physical Review C*, **58** : 1804–1828 (1998).
- Alford, M., Bowers, J., Rajagopal, K., Colour superconductivity in compact stars, *Journal of Physics G Nuclear Physics*, **27** : 541–555 (2001).
- Alpar, M. A., Chau, H. F., Cheng, K. S., Pines, D., Postglitch relaxation of the VELA pulsar after its first eight large glitches - A reevaluation with the vortex creep model, *ApJ*, **409** : 345–359 (1993).
- Alpar, M. A., Chau, H. F., Cheng, K. S., Pines, D., Postglitch Relaxation of the Crab Pulsar after Its First Four Major Glitches : The Combined Effects of Crust Cracking, Formation of Vortex Depletion Region and Vortex Creep, *ApJ*, **459** : 706–+ (1996).
- Alpar, M. A., Langer, S. A., Sauls, J. A., Rapid postglitch spin-up of the superfluid core in pulsars, *ApJ*, **282** : 533–541 (1984a).
- Alpar, M. A., Pines, D., Anderson, P. W., Shaham, J., Vortex creep and the internal temperature of neutron stars. I - General theory, *ApJ*, **276** : 325–334 (1984b).
- Altmann, S. L., *Band theory of solids : an introduction from the point of view of symmetry*, Clarendon Press, Oxford, 286 pages (1991).
- Andersen, O. K., Linear methods in band theory, *Phys. Rev. B: Solid State*, **12** : 3060–3083 (1975).
- Anderson, P. W., Itoh, N., Pulsar glitches and restlessness as a hard superfluidity phenomenon, *Nature*, **256** : 25–27 (1975).
- Andersson, N., TOPICAL REVIEW : Gravitational waves from instabilities in relativistic stars, *Classical and Quantum Gravity*, **20** : 105– (2003).
- Andersson, N., Comer, G. L., On the dynamics of superfluid neutron star cores, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, **328** : 1129–1143 (2001a).
- Andersson, N., Comer, G. L., Probing Neutron-Star Superfluidity with Gravitational-Wave Data, *Physical Review Letters*, **87(24)** : 241101–+ (2001b).
- Andersson, N., Comer, G. L., Prix, R., The superfluid two-stream instability, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, pages 332–+ (2004).
- Andreev, A. F., Bashkin, E. P., Three-velocity hydrodynamics of superfluid solutions, *Sov. Phys. JETP*, **42** : 164–167 (1975).

- Arponen, J., Internal structure of neutron stars, *Nuclear Physics A*, **191** : 257–282 (1972).
- Ashcroft, N. W., Mermin, N. D., *La physique des solides*, EDP Sciences, 986 pages (2003).
- Austin, B. J., Heine, V., Sham, L. J., General Theory of Pseudopotentials, *Physical Review*, **127** : 276–282 (1962).
- Backer, D. C., Kulkarni, S. R., Heiles, C., Davis, M. M., Goss, W. M., A millisecond pulsar, *Nat.*, **300** : 615–618 (1982).
- Balberg, S., Lichtenstadt, I., Cook, G. B., Roles of Hyperons in Neutron Stars, *ApJ, Supp.*, **121** : 515–531 (1999).
- Baldereschi, A., Mean-Value Point in the Brillouin Zone, *Phys. Rev. B: Solid State*, **7** : 5212–5215 (1973).
- Baldo, M., Bombaci, I., Burgio, G. F., Microscopic nuclear equation of state with three-body forces and neutron star structure, *A&A*, **328** : 274–282 (1997).
- Baldo, M., Burgio, G. F., Schulze, H.-J., Hyperon stars in the Brueckner-Bethe-Goldstone theory, *Phys. Rev. C*, **61(5)** : 055801+ (2000).
- Barkat, Z., Buchler, J., Ingber, L., Equation of State of Neutron-Star Matter at Sub-nuclear Densities, *ApJ*, **176** : 723+ (1972).
- Barranco, F., Broglia, R. A., Esbensen, H., Vigezzi, E., Semiclassical approximation to neutron star superfluidity corrected for proximity effects, *Phys. Rev. C*, **58** : 1257–1262 (1998).
- Bartel, J., Quentin, P., Brack, M., Guet, C., Hakansson, H.-B., Towards a better parametrisation of Skyrme-like effective forces : A critical study of the SkM force, *Nuclear Physics A*, **386** : 79–100 (1982).
- Baym, G., Bethe, H. A., Pethick, C. J., Neutron Star Matter, *Nucl. Phys. A*, **175** : 225–271 (1971a).
- Baym, G., Pethick, C. J., Pines, D., Superfluidity in neutron stars, *Nature*, **224** : 673–674 (1969).
- Baym, G., Pethick, C. J., Sutherland, P., The Ground State of Matter at High Densities : Equation of State and Stellar Models, *ApJ*, **170** : 299–317 (1971b).
- Bender, M., Heenen, P., Reinhard, P., Self-consistent mean-field models for nuclear structure, *Reviews of Modern Physics*, **75** : 121–180 (2003).
- Berger, J. F., *Les noyaux en pleine forme, Approches de champ moyen et au delà*, Ecole Joliot-Curie de Physique Nucléaire, 33-116 (1991).
- Berger, M., Topological methods in astrophysics, *Phil. Trans. R. Soc. London A*, **359** : 1439–1448 (2001).
- Bethe, H. A., *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, **21** : 93 (1971).
- Bethe, H. A., Bacher, R. F., Nuclear Physics A. Stationary States of Nuclei, *Reviews of Modern Physics*, **8** : 82–229 (1936).

- Bethe, H. A., Borner, G., Sato, K., Nuclei in Neutron Matter, *A&A*, **7** : 279–+ (1970).
- Biró, L. P., Bálint, Z., Kertész, K., Vértesy, Z., Márk, G. I., Horváth, Z. E., Balázs, J., Méhn, D., Kiricsi, I., Lousse, V., Vigneron, J.-P., Role of photonic-crystal-type structures in the thermal regulation of a Lycaenid butterfly sister species pair, *Phys. Rev. E*, **67(2)** : 021907–+ (2003).
- Blaizot, J. P., Tolénado, J. C., *Symétries et physique microscopique*, Ecole Polytechnique, Ellipses, 189 pages (1997).
- Blöchl, P. E., Jepsen, O., Andersen, O. K., Improved tetrahedron method for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B: Solid State*, **49** : 16223–16233 (1994).
- Bloch, F., Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern, *Z. Physik*, **52** : 555–559 (1928).
- Bodmer, A. R., Collapsed Nuclei, *Phys. Rev. D*, **4** : 1601–1606 (1971).
- Bohr, N., Wheeler, J. A., The Mechanism of Nuclear Fission, *Physical Review*, **56** : 426–450 (1939).
- Bombaci, I., Bombaci, I., Bonaccorso, A., Fabrocini, A. (eds.), *Perspectives on theoretical nuclear physics*, page 223 (1995).
- Bonazzola, S., The virial theorem in general relativity, *ApJ*, **182** : 335–340 (1973).
- Bonazzola, S., Gourgoulhon, E., A formulation of the virial theorem in general relativity, *Class. Quantum Grav.*, **11** : 443–452 (1994a).
- Bonazzola, S., Gourgoulhon, E., A virial identity applied to relativistic stellar models, *Class. Quantum Grav.*, **11** : 1775–1784 (1994b).
- Bonazzola, S., Gourgoulhon, E., Marck, J., Numerical approach for high precision 3D relativistic star models, *Phys. Rev. D*, **58(10)** : 104020–+ (1998).
- Borumand, M., Joynt, R., Kluźniak, W., Superfluid densities in neutron-star matter, *Phys. Rev. C*, **54** : 2745–2750 (1996).
- Brack, M., Guet, C., Hakansson, H.-B., Selfconsistent semiclassical description of average nuclear properties—a link between microscopic and macroscopic models, *Phys. Rep.*, **123** : 275–364 (1985).
- Brandow, B. H., Linked-Cluster Expansions for the Nuclear Many-Body Problem, *Reviews of Modern Physics*, **39** : 771–828 (1967).
- Brandt, S., *Kernerstoff under nuklear toethed*, Ph.D. thesis, Copenhagen University (1985).
- Brockmann, R., Machleidt, R., Nuclear saturation in a relativistic Brueckner-Hartree-Fock approach, *Physics Letters B*, **149** : 283–287 (1984).
- Brueckner, K. A., Gammel, J. L., Properties of Nuclear Matter, *Physical Review*, **109** : 1023–1039 (1958).
- Buchler, J., Barkat, Z., Properties of Low-Density Neutron-Star Matter, *Physical Review Letters*, **27** : 48–51 (1971).

- Burbidge, G. R., Strittmatter, P. A., *Nature Lond.*, **218** : 433 (1968).
- Callaway, J., Orthogonalized Plane Wave Method, *Physical Review*, **97** : 933–936 (1955).
- Cameron, A. G., Neutron Star Models., *ApJ*, **130** : 884+ (1959).
- Caraveo, P. A., Bignami, G. F., Mignani, R., Taff, L. G., Parallax Observations with the Hubble Space Telescope Yield the Distance to Geminga, *ApJ, Lett.*, **461** : L91+ (1996).
- Cartan, E., Sur les variétés à connexion affine et la théorie de la relativité généralisée (première partie), *Ann. Sci. Ecole Norm. Sup.*, **40** : 325–412 (1923).
- Cartan, E., Sur les variétés à connexion affine et la théorie de la relativité généralisée (première partie, suite), *Ann. Sci. Ecole Norm. Sup.*, **41** : 1–25 (1924).
- Cartan, E., Sur les variétés à connexion affine et la théorie de la relativité généralisée (seconde partie), *Ann. Sci. Ecole Norm. Sup.*, **42** : 17–88 (1925).
- Carter, B., Covariant theory of conductivity in ideal fluid or solid media, Anile, A., Choquet-Bruhat, Y. (eds.), *Relativistic fluid dynamics*, Springer-Verlag, pages 1–64 (1989).
- Carter, B., Chamel, N., Covariant analysis of Newtonian multi-fluid models for neutron stars : II Stress - energy tensors and virial theorems, *accepté pour publication dans Int. J. of Mod. Phys. D* (2003).
- Carter, B., Chamel, N., Covariant analysis of Newtonian multi-fluid models for neutron stars : III Transvective, viscous, and superfluid drag dissipation, *ArXiv Astrophysics e-prints astro-ph/0410660* (2004b).
- Carter, B., Chamel, N., Covariant Analysis of Newtonian Multi-Fluid Models for Neutron Stars I :, *International Journal of Modern Physics D*, **13** : 291–325 (2004a).
- Carter, B., Chamel, N., Haensel, P., Effect of BCS pairing on entrainment in neutron superfluid current in neutron star crust, *ArXiv Astrophysics e-prints* (2004a).
- Carter, B., Chamel, N., Haensel, P., Entrainment coefficient and effective mass for conduction neutrons in neutron star crust : Macroscopic treatment, *ArXiv Astrophysics e-prints astro-ph/0408083* (2004b).
- Carter, B., Chamel, N., Haensel, P., Entrainment coefficient and effective mass for conduction neutrons in neutron star crust : Simple microscopic models, *Nucl. phys. A*, **748** : 675–697 (2005).
- Carter, B., Gaffet, B., Standard covariant formulation for perfect fluid dynamics, *J. Fluid Mech.*, **186** : 1–24 (1988).
- Carter, B., Khalatnikov, I. M., Equivalence of convective and potential variational derivations of covariant superfluid dynamics, *Phys. Rev. D*, **45** : 4536–4544 (1992).
- Carter, B., Langlois, D., Prix, R., Relativistic solution of Iordanskii problem in multi-constituent superfluid mechanics, Huebener, R. P., Schopohl, N., Volovik, G. E. (eds.), *Solid-state science Vol. 132 : Vortices in unconventional superconductors and superfluids*, Springer, pages 167–173 (2002).

- Carter, B., Langlois, D., Sedrakian, D. M., Centrifugal buoyancy as a mechanism for neutron star glitches, *A&A*, **361** : 795–802 (2000).
- Ceperley, D. M., Alder, B. J., Ground state of the electron gas by a stochastic method, *Physical Review Letters*, **45** : 566–569 (1980).
- Chabanat, E., *Intéactions effectives pour des conditions extrêmes d'isospin*, Ph.D. thesis, Université Claude-Bernard Lyon 1 (1995).
- Chabanat, E., Bonche, P., Haensel, P., Meyer, J., Schaeffer, R., A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities, *Nuclear Physics A*, **627** : 710–746 (1997).
- Chabanat, E., Bonche, P., Haensel, P., Meyer, J., Schaeffer, R., A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities Part II. Nuclei far from stabilities, *Nuclear Physics A*, **635** : 231–256 (1998a).
- Chabanat, E., Bonche, P., Haensel, P., Meyer, J., Schaeffer, R., Erratum to “A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities. (II) : Nuclei far from stabilities” [Nucl. Phys. A 635 (1998) 231-256], *Nuclear Physics A*, **643** : 441–441 (1998b).
- Chadi, D. J., Cohen, M. L., Special Points in the Brillouin Zone, *Phys. Rev. B: Solid State*, **8** : 5747–5753 (1973).
- Chamel, N., Band structure effects for dripped neutrons in neutron star crust, *Nucl. Phys. A*, **747** : 109–128 (2005).
- Cheng, K. S., Yao, C. C., Dai, Z. G., Properties of nuclei in the inner crusts of neutron stars in the relativistic mean-field theory, *Phys. Rev. C*, **55** : 2092–2100 (1997).
- Coester, F., Cohen, S., Day, B., Vincent, C. M., Variation in Nuclear-Matter Binding Energies with Phase-Shift-Equivalent Two-Body Potentials, *Phys. Rev. C*, **1** : 769–776 (1970).
- Cohen, M. H., Heine, V., Cancellation of Kinetic and Potential Energy in Atoms, Molecules, and Solids, *Physical Review*, **122** : 1821–1826 (1961).
- Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., Laloë, F., *Mécanique quantique I*, Hermann, 240-244 (1998).
- Collins, G. W., *The virial theorem in stellar astrophysics*, Pachart, Tucson (1978).
- Collins, J. C., Perry, M. J., Superdense matter : Neutrons or asymptotically free quarks?, *Physical Review Letters*, **34** : 1353–1356 (1975).
- Comer, G. L., Joynt, R., Relativistic mean field model for entrainment in general relativistic superfluid neutron stars, *Phys. Rev. D*, **68(2)** : 023002–+ (2003).
- Comer, G. L., Langlois, D., Lin, L. M., Quasinormal modes of general relativistic superfluid neutron stars, *Phys. Rev. D*, **60(10)** : 104025–+ (1999).
- Cooke, J. F., Davis, H. L., Mostoller, M., Interpolated band-structure models and integration schemes, *Phys. Rev. B: Solid State*, **11** : 706–709 (1975).

- Cooke, J. F., Wood, R. F., Comparison of Brillouin-Zone Integration Methods : Combined Linear and Quadratic Interpolation, *Phys. Rev. B: Solid State*, **5** : 1276–1283 (1972).
- Cowan, R. D., *The theory of atomic structure and spectra*, University of California Press (1981).
- Cunningham, S. L., Special points in the two-dimensional Brillouin zone, *Phys. Rev. B: Solid State*, **10** : 4988–4994 (1974).
- Dall’Osso, D., Israel, G. L., Stella, L., Possenti, A., Perozzi, E., The Glitches of the Anomalous X-Ray Pulsar 1RXS J170849.0-400910, *Astroph. J.*, **599** : 485–497 (2003).
- Day, B. D., Elements of the Brueckner-Goldstone Theory of Nuclear Matter, *Reviews of Modern Physics*, **39** : 719–744 (1967).
- de Blasio, F. V., Lazzari, G., Lattice defects in the crust of a neutron star, *Nuclear Physics A*, **633** : 391–405 (1998).
- Dean, D. J., Hjorth-Jensen, M., Pairing in nuclear systems : from neutron stars to finite nuclei, *Reviews of Modern Physics*, **75** : 607–656 (2003).
- Donati, P., Pizzochero, P. M., Is there Nuclear Pinning of Vortices in Superfluid Pulsars?, *Physical Review Letters*, **90(21)** : 211101–+ (2003).
- Donati, P., Pizzochero, P. M., Fully consistent semi-classical treatment of vortex-nucleus interaction in rotating neutron stars, *Nuclear physics A*, **742** : 363–379 (2004).
- Douchin, F., *Equation d’état de la matière nucléaire ultra-dense : étoiles à neutrons et coeur des naines blanches massives*, Ph.D. thesis, Ecole Normale Supérieure de Lyon (1999).
- Douchin, F., Haensel, P., Inner edge of neutron-star crust with SLy effective nucleon-nucleon interactions, *Physics Letters B*, **485** : 107–114 (2000).
- Douchin, F., Haensel, P., A unified equation of state of dense matter and neutron star structure, *A&A*, **380** : 151–167 (2001).
- Douchin, F., Haensel, P., Meyer, J., Nuclear surface and curvature properties for SLy Skyrme forces and nuclei in the inner neutron-star crust, *Nuclear Physics A*, **665** : 419–446 (2000).
- Duncan, R. C., Thompson, C., Formation of very strongly magnetized neutron stars - Implications for gamma-ray bursts, *ApJ, Lett.*, **392** : L9–L13 (1992).
- Duneau, M., Katz, A., Quasiperiodic patterns, *Physical Review Letters*, **54** : 2688–2691 (1985).
- Easson, I., Postglitch behavior of the plasma inside neutron stars, *ApJ*, **228** : 257–267 (1979b).
- Easson, I., Long-term changes in pulsar periods and the plasma in neutron star interiors, *ApJ*, **233** : 711–716 (1979a).
- Ellis, G. F. R., Uzan, J. P., ‘c’ is the speed of light, isn’t it?, *ArXiv e-prints* (2003).

- Entem, D. R., Machleidt, R., Accurate charge-dependent nucleon-nucleon potential at fourth order of chiral perturbation theory, *Phys. Rev. C*, **68(4)** : 041001–+ (2003).
- Epstein, R. I., Acoustic properties of neutron stars, *ApJ*, **333** : 880–894 (1988).
- Farine, M., Von-Eiff, D., Schuck, P., Berger, J. F., Dechargé, J., Girod, M., Towards a new effective interaction of the Gogny type, *Journal of Physics G Nuclear Physics*, **25** : 863–866 (1999).
- Fetter, A. L., Walecka, J. D., *Quantum theory of many particle systems*, International series in pure and applied physics, Mc Graw Hill (1971).
- Feynman, R. P., Forces in Molecules, *Physical Review*, **56** : 340–343 (1939).
- Floquet, G., Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques, *Ann. Sci. Ecole Norm. Sup.*, **12** : 47–88 (1883).
- Flowers, E., Ruderman, M. A., Evolution of pulsar magnetic fields, *ApJ*, **215** : 302–310 (1977).
- Franco, L. M., Link, B., Epstein, R. I., Quaking Neutron Stars, *ApJ*, **543** : 987–994 (2000).
- Frenkel, Y. I., *Z. Physik*, **50** : 234–248 (1928).
- Friedman, B., Pandharipande, V. R., Hot and cold, nuclear and neutron matter, *Nuclear Physics A*, **361** : 502–520 (1981).
- Friedman, J. L., Schutz, B. F., Lagrangian perturbation theory of nonrelativistic fluids, *ApJ*, **221** : 937–957 (1978).
- Friedrichs, K., Eine invariante Formulierung des Newtonschen Gravitationsgesetzes und des Grenzüberganges vom Einsteinschen zum Newtonschen Gesetz, *Math. Ann.*, **98** : 566–575 (1927).
- Fritz, R., Müther, H., Machleidt, R., Dirac effects in the Hartree-Fock description of finite nuclei employing realistic forces, *Physical Review Letters*, **71** : 46–49 (1993).
- Fuchs, C., The Relativistic Dirac-Brueckner Approach to Nuclear Matter, *Lecture Notes in Physics, Berlin Springer Verlag*, **641** : 119–146 (2004).
- Gilat, G., Analysis of methods for calculating spectral properties in solids, *J. Comp. Phys.*, **10** : 432–465 (1972).
- Gilat, G., Interpolation versus Extrapolation in Brillouin-Zone-Integration Schemes, *Phys. Rev. B: Solid State*, **7** : 891–893 (1973).
- Gilat, G., General analytic method of zone integration for joint densities of states in metals, *Phys. Rev. B: Solid State*, **26** : 2243–2246 (1982).
- Gilat, G., Bharatiya, N. R., Tetrahedron method of zone integration : Inclusion of matrix elements, *Phys. Rev. B: Solid State*, **12** : 3479–3481 (1975).
- Gilat, G., Dolling, G., *Phys. Lett.*, **8** : 304 (1964).
- Gilat, G., Kam, Z., High-Resolution Method for Calculating Spectra of Solids, *Physical Review Letters*, **22** : 715–717 (1969a).

- Gilat, G., Kam, Z., High-Resolution Method for Calculating Spectra of Solids, *Physical Review Letters*, **22** : 715–717 (1969b).
- Gilat, G., Raubenheimer, L. J., Accurate Numerical Method for Calculating Frequency-Distribution Functions in Solids, *Physical Review*, **144** : 390–395 (1966).
- Glendenning, N. K., Neutron stars are giant hypernuclei?, *ApJ*, **293** : 470–493 (1985).
- Glendenning, N. K., *Compact Stars : Nuclear Physics, Particle Physics, and General Relativity*, Springer (1997).
- Gogny, D., Ripka, G., Porneuf, M. (eds.), *Proceedings of the international conference on nuclear self-consistent fields*, International Center for Theoretical Physics, Trieste, North Holland, Amsterdam, page 333 (1975).
- Gold, T., Rotating neutron stars as the origin of the pulsating radio sources, *Nature*, **218** : 731–732 (1968).
- Goldreich, P., Julian, W. H., Pulsar Electrodynamics, *ApJ*, **157** : 869–880 (1969).
- Grosso, G., Parravicini, G. P., *Solid State Physics*, Academic Press, 714 pages (2000).
- Gusakov, M. E., Yakovlev, D. G., Haensel, P., Gnedin, O. Y., Direct Urca process in a neutron star mantle, *A&A*, **421** : 1143–1148 (2004).
- Guyon, E., Hulin, J.-P., Petit, L., *Hydrodynamique physique*, InterEditions, 506 pages, Paris (1991).
- Haensel, P., Equation of State of Dense Matter and Maximum Mass of Neutron Stars, *EAS Publications Series, Volume 7, 2003, Final Stages of Stellar Evolution, Proceedings of the conference held 16-21 September, 2001 in Aussois, France. Edited by C. Motch and J.-M. Hameury, pp.249., 7* : 249–+ (2003).
- Haensel, P., Pichon, B., Experimental nuclear masses and the ground state of cold dense matter, *A&A*, **283** : 313–318 (1994).
- Hama, J., Watanabe, M., General formulae for the special points and their weighting factors in k-space integration , *Journal of the Physics of Condensed Matter*, **4** : 4583–4594 (1992).
- Hammermesh, M., *Group theory and its application to physical problems*, Dover publications, Inc. New York (1989).
- Harmon, B. N., Koelling, D. D., Freeman, A. J., Convergence properties of APW wavefunctions and matrix elements , *Journal of Physics C Solid State Physics*, **6** : 2294–2299 (1973).
- Harrison, B., Thorne, K. S., Wakano, M., Wheeler, J. A., *Gravitation theory and gravitational collapse*, University of Chicago Press, Chicago, Illinois (1965).
- Harrison, W. A., *Solid State Theory*, Dover, 572 pages (1980).
- Hashimoto, M., Seki, H., Yamada, M., Shape of nuclei in the crust of neutron star, *Prog. Theor. Phys.*, **71** : 320–326 (1984).

- Havas, P., Four-Dimensional Formulations of Newtonian Mechanics and Their Relation to the Special and the General Theory of Relativity, *Reviews of Modern Physics*, **36** : 938–965 (1964).
- Herring, C., A New Method for Calculating Wave Functions in Crystals, *Physical Review*, **57** : 1169–1177 (1940).
- Hewish, A., Bell, S. J., Pilkington, J. D. H., Scott, P. F., Collins, R. A., Observation of a Rapidly Pulsating Radio Source, *Nature*, **217** : 709–713 (1968).
- Hobbs, G., Faulkner, A., Stairs, I. H., Camilo, F., Manchester, R. N., Lyne, A. G., Kramer, M., D’Amico, N., Kaspi, V. M., Possenti, A., McLaughlin, M. A., Lorimer, D. R., Burgay, M., Joshi, B. C., Crawford, F., The Parkes multibeam pulsar survey - IV. Discovery of 180 pulsars and parameters for 281 previously known pulsars, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, **352** : 1439–1472 (2004).
- Hobbs, G., Lyne, A. G., Joshi, B. C., Kramer, M., Stairs, I. H., Camilo, F., Manchester, R. N., D’Amico, N., Possenti, A., Kaspi, V. M., A very large glitch in PSR J1806-2125, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, **333** : L7–L10 (2002).
- Hohenberg, P., Kohn, W., Inhomogeneous Electron Gas, *Physical Review*, **136** : 864–871 (1964).
- Hulse, R. A., Taylor, J. H., Discovery of a pulsar in a binary system, *ApJ, Lett.*, **195** : L51–LL53 (1975).
- Ichimaru, S., Strongly coupled plasmas : high-density classical plasmas and degenerate electron liquids, *Reviews of Modern Physics*, **54** : 1017–1059 (1982).
- Janak, J. F., Accurate computation of the density of states of copper, *Physics Letters A*, **28** : 570–571 (1969).
- Janak, J. F., Gilat-Raubenheimer methods for k-space integration, Marcus, P. M., Janak, J. F., Williams, A. R. (eds.), *Computational methods in band theory*, Plenum, New York, pages 323–339 (1971).
- Janak, J. F., Eastman, D. E., Williams, A. R., *Solid state commun.*, **8** : 271 (1970).
- Jelitto, R., The density of states of some simple excitations in solids, *J. Phys. Chem. Solids*, **30** : 609–626 (1969).
- Jepsen, O., Andersen, O. K., *Solid State Commun.*, **9** : 1763 (1971).
- Jepsen, O., Madsen, J., Andersen, O. K., Band structure of thin films by the linear augmented-plane-wave method, *Phys. Rev. B: Solid State*, **18** : 605–615 (1978).
- Joannopoulos, J., Villeneuve, P., Fan, S., Photonic crystals : putting a new twist on light, *Nature*, **386** : 143–149 (1997).
- Johnston, D. F., Group theory in solid state physics, *Rep. Prog. Phys.*, **23** : 66–153 (1960).
- Jones, D. I., Andersson, N., Freely precessing neutron stars : model and observations, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, **324** : 811–824 (2001).

- Jones, P. B., The origin of pulsar glitches, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, **296** : 217–224 (1998).
- Jones, P. B., Heterogeneity of solid neutron-star matter : transport coefficients and neutrino emissivity, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, **351** : 956–966 (2004).
- Jones, W., March, N. H., *Theoretical Solid State Physics, volume 1 : perfect lattices in equilibrium*, Dover, 680 pages (1985).
- Kümmel, H., Lührmann, K. H., Zabolitzky, J. G., Many-fermion theory in expS- (or coupled cluster) form, *Phys. Rep.*, **36** : 1–63 (1978).
- Kam, Z., Gilat, G., Accurate Numerical Method for Calculating Frequency Distribution Functions in Solids. III. Extension to Tetragonal Crystals, *Physical Review*, **175** : 1156–1163 (1968).
- Kaminker, A. D., Pethick, C. J., Potekhin, A. Y., Thorsson, V., Yakovlev, D. G., Neutrino-pair bremsstrahlung by electrons in neutron star crusts, *A&A*, **343** : 1009–1024 (1999).
- Kaplan, D. B., Nelson, A. E., Strange goings on in dense nucleonic matter, *Physics Letters B*, **175** : 57–63 (1986).
- Kaspi, V. M., Gavriil, F. P., A Second Glitch from the “Anomalous” X-Ray Pulsar 1RXS J170849.0-4000910, *ApJ, Lett.*, **596** : L71–L74 (2003).
- Kaspi, V. M., Lackey, J. R., Chakrabarty, D., A Glitch in an Anomalous X-Ray Pulsar, *ApJ, Lett.*, **537** : L31–L34 (2000).
- Kijowski, J., Tulczyjew, M., Kasper, U., A Symplectic Framework for Field Theories, *Astronomische Nachrichten*, **302** : 113–+ (1981).
- Killingbeck, J., Group theory and topology in solid state physics , *Reports of Progress in Physics*, **33** : 533–644 (1970).
- Kittel, C., *Quantum theory of solids*, Wiley, 448 pages (1963).
- Knox, G. F., Gold, A., *Symmetry in the solid state*, Benjamin, New York (1964).
- Koelling, D. D., REVIEW ARTICLE : Self-consistent energy band calculations, *Reports of Progress in Physics*, **44** : 139–212 (1981).
- Koelling, D. D., Arbman, G. O., Use of energy derivative of the radial solution in an augmented plane wave method : application to copper , *Journal of Physics F Metal Physics*, **5** : 2041–2054 (1975).
- Koenderink, A. F., Bechger, L., Schriemer, H. P., Lagendijk, A., Vos, W. L., Broadband Fivefold Reduction of Vacuum Fluctuations Probed by Dyes in Photonic Crystals, *Physical Review Letters*, **88(14)** : 143903–+ (2002).
- Kohn, W., Sham, L. J., Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, *Physical Review*, **140** : 1133–1138 (1965).
- Koster, G. F., Space groups and their representations, Seitz, F., Turnbull, D. (eds.), *Solid state physics*, Academic Press inc., Publishers, pages 173–256 (1957).

- Krawczyk, A., Lyne, A. G., Gil, J. A., Joshi, B. C., Observations of 14 pulsar glitches, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, **340** : 1087–1094 (2003).
- Krivine, H., Treiner, J., Bohigas, O., Derivation of a fluid-dynamical lagrangian and electric giant resonances, *Nuclear Physics A*, **336** : 155–184 (1980).
- Lai, D., Matter in strong magnetic fields, *Reviews of Modern Physics*, **73** : 629–+ (2001).
- Landau, L. D., Lifshitz, E. M., *Physique théorique, tome 6 : Mécanique des fluides*, éd. librairie du globe, éditions Mir (1989).
- Langer, W. D., Rosen, L. C., Cohen, J. M., Cameron, A. G. W., An Equation of State at Subnuclear Densities, *Astr. and Space Sci.*, **5** : 259–+ (1969).
- Lassaut, M., Flocard, H., Bonche, P., Heenen, P. H., Suraud, E., Equation of state of hot dense matter, *A&A*, **183** : L3–L6 (1987).
- Lee, J., Shishidou, T., Freeman, A. J., Improved triangle method for two-dimensional Brillouin zone integrations to determine physical properties, *Phys. Rev. B: Solid State*, **66(23)** : 233102–+ (2002).
- Lee, U., Nonradial oscillations of neutron stars with the superfluid core., *A&A*, **303** : 515–+ (1995).
- Lee, U., Yoshida, S., r-Modes of Neutron Stars with Superfluid Cores, *ApJ*, **586** : 403–418 (2003).
- Lehmann, G., Taut, M., *Phys. Status Solidi B*, **54** : 469 (1972).
- Lin, C. C., *Liquid Helium*, G. Careri, Academic, New York (1963).
- Lindblom, L., Mendell, G., The oscillations of superfluid neutron stars, *ApJ*, **421** : 689–704 (1994).
- Link, B., Constraining Hadronic Superfluidity with Neutron Star Precession, *Physical Review Letters*, **91(10)** : 101101–+ (2003).
- Link, B., Epstein, R. I., Baym, G., Superfluid vortex creep and rotational dynamics of neutron stars, *ApJ*, **403** : 285–302 (1993).
- Link, B., Franco, L. M., Epstein, R. I., Starquake-induced Magnetic Field and Torque Evolution in Neutron Stars, *ApJ*, **508** : 838–843 (1998).
- Lorenz, C., Ravenhall, D. G., Pethick, C. J., Neutron star crusts, *Physical Review Letters*, **70** : 379–382 (1993).
- Loucks, T. L., *The augmented plane wave method*, Benjamin, New York (1967).
- Lunney, D., Pearson, J. M., Thibault, C., Recent trends in the determination of nuclear masses, *Reviews of Modern Physics*, **75** : 1021–1082 (2003).
- Lévy, L. P., *Magnétisme et supraconductivité*, Savoirs actuels, InterEditions, CNRS Editions, 349-366 (1997).
- Lyne, A. G., Pritchard, R. S., Graham-Smith, F., Camilo, F., Very low braking index for the VELA pulsar., *Nat.*, **381** : 497–498 (1996).

- Lyne, A. G., Pritchard, R. S., Smith, F. G., Crab pulsar timing 1982-87, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, **233** : 667–676 (1988).
- Müther, H., Isobar degrees of freedom and the nuclear many-body problem, *Progress in Particle and Nuclear Physics*, **14** : 123–187 (1985).
- MacDonald, A. H., Vosko, S. H., Coleridge, P. T., Extensions of the tetrahedron method for evaluating spectral properties of solids, *Journal of Physics C Solid State Physics*, **12** : 2991–3002 (1979).
- Machleidt, R., *Advance of Nuclear Physics*, **19** : 189– (1989).
- Machleidt, R., Slaus, I., TOPICAL REVIEW : The nucleon-nucleon interaction, *Journal of Physics G Nuclear Physics*, **27** : 69– (2001).
- Mackie, F. D., Baym, G., Compressible liquid drop nuclear model and mass formula, *Nuclear Physics A*, **285** : 332–348 (1977).
- Macot, L., Frank, B., Formulas for the Chadi-Cohen process, *Phys. Rev. B: Solid State*, **41** : 4469–4474 (1990).
- Magierski, P., Bulgac, A., Heenen, P.-H., Exotic nuclear phases in the inner crust of neutron stars in the light of Skyrme-Hartree-Fock theory, *Nuclear Physics A*, **719** : 217–220 (2003).
- Magierski, P., Heenen, P.-H., Structure of the inner crust of neutron stars : Crystal lattice or disordered phase?, *Phys. Rev. C*, **65(4)** : 045804–+ (2002).
- Manchester, R. N., Radio searches for pulsars associated with supernova remnants, *Memorie della Societa Astronomica Italiana*, **69** : 801–+ (1998).
- Manchester, R. N., Newton, L. M., Durdin, J. M., A second measurement of a pulsar braking index, *Nat.*, **313** : 374–376 (1985).
- Marcus, P. M., *Int. J. Quant. Chem.*, **1S** : 567–588 (1967).
- Marder, M. P., *Condensed Matter Physics*, Wiley-Interscience, 928 pages (2000).
- McCrea, W., Milne, E. A., Newtonian universes and the curvature of space, *Quart. J. Math (Oxford Ser.)*, **5** : 73 (1934).
- McKenna, J., Lyne, A. G., PSR1737 - 30 and period discontinuities in young pulsars, *Nat.*, **343** : 349–+ (1990).
- Mendell, G., *Superfluid Hydrodynamics in Neutron Stars*, Ph.D. thesis, Montana state university (1991a).
- Mendell, G., Superfluid hydrodynamics in rotating neutron stars. I - Nondissipative equations. II - Dissipative effects, *ApJ*, **380** : 515–540 (1991b).
- Methfessel, M., Paxton, A. T., High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals, *Phys. Rev. B: Solid State*, **40** : 3616–3621 (1989).
- Migdal, A. B., Superfluidity and the moments of inertia of nuclei, *Nucl. Phys.*, **13** : 655 (1959).
- Migdal, A. B., *Zh. Exp. Teoret. Fiz.*, **61** : 1184 (1971).

- Migdal, A. B., *Soviet Phys. JETP*, **36** : 1052 (1972).
- Milne, E. A., A Newtonian expanding Universe, *Quart. J. Math (Oxford Ser.)*, **5** : 64 (1934).
- Moffat, H. K., The degree of knottedness of tangled vortex lines, *J. Fluid Mech.*, **35** : 117–129 (1969).
- Moffat, H. K., A., T., Helicity in laminar and turbulent flow, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **24** : 281–312 (1992).
- Monkhorst, H. J., Pack, J. D., Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B: Solid State*, **13** : 5188–5192 (1976).
- Montani, F., May, C., M  ther, H., Mean field and pairing properties in the crust of neutron stars, *Phys. Rev. C*, **69(6)** : 065801–+ (2004).
- Moreau, J. J., Constantes d’un ilot tourbillonnaire en fluide parfait barotrope, *C.R. Acad. Sci. (Paris)*, **252** : 2810–2812 (1961).
- Morii, M., Kawai, N., Shibazaki, N., Pulse Profile Change Possibly Associated with a Glitch in an Anomalous X-Ray Pulsar 4U 0142+61, *accept   pour publication dans Astr. Phys. J.* (2004).
- Morita, T., Horiguchi, T., Calculation of the Lattice Green’s function for the bcc, fcc and rectangular lattices, *J. Math. Phys.*, **12** : 986–992 (1971a).
- Morita, T., Horiguchi, T., Lattice Green’s functions for the cubic lattices in terms of the complete elliptic integral, *J. Math. Phys.*, **12** : 981–986 (1971b).
- Morse, P. M., The Quantum Mechanics of Electrons in Crystals, *Physical Review*, **35** : 1310–1324 (1930).
- Myers, w. D., Swiatecki, W. J., Nuclear masses and deformations, *Nucl. Phys.*, **81** : 1 (1966).
- Nagara, H., Nagata, Y., Nakamura, T., Melting of the Wigner crystal at finite temperature, *Phys. Rev. A: General Physics*, **36** : 1859–1873 (1987).
- Negele, J. W., Vautherin, D., Density-Matrix Expansion for an Effective Nuclear Hamiltonian, *Phys. Rev. C*, **5** : 1472–1493 (1972).
- Negele, J. W., Vautherin, D., Neutron star matter at sub-nuclear densities, *Nuclear Physics A*, **207** : 298–320 (1973).
- Negele, J. W., Vautherin, D., Density-matrix expansion for an effective nuclear Hamiltonian. II, *Phys. Rev. C*, **11** : 1031–1041 (1975).
- Niu, Q., Wu, B., Choi, D., Bloch Oscillations and Zener Tunneling of BEC in Optical Lattices, *APS Meeting Abstracts*, pages 4009–+ (2000).
- Oppenheimer, J. R., Volkoff, G. M., On Massive Neutron Cores, *Physical Review*, **55** : 374–381 (1939).
- Oyamatsu, K., Nuclear shapes in the inner crust of a neutron star, *Nuclear Physics A*, **561** : 431–452 (1993).

- Oyamatsu, K., Hashimoto, M., Yamada, M., Further study of nuclear shape in high density matter, *Prog. Theor. Phys.*, **72** : 373–375 (1984).
- Oyamatsu, K., Yamada, M., Shell energies of non-spherical nuclei in the inner crust of a neutron star, *Nuclear Physics A*, **578** : 181–203 (1994).
- Pérez García, M. A., Corte Rodríguez, N., Mornas, L., Suárez Curieses, J. P., Díaz Alonso, J., Formation of an ordered phase in neutron star matter, *Nuclear Physics A*, **699** : 939–962 (2002).
- Pacini, F., Energy emission from a neutron star, *Nature*, **216** : 567 (1967).
- Pandharipande, V. R., Ravenhall, D. G., Hot Nuclear Matter, *NATO ASIB Proc. 205 : Nuclear Matter and Heavy Ion Collisions*, pages 103–+ (1989).
- Peradzynski, Z., Helicity theorem and vortex lines in superfluid 4He , *Int. J. Theo. Phys.*, **29** : 1277–1284 (1990).
- Pethick, C. J., Potekhin, A. Y., Liquid crystals in the mantles of neutron stars, *Physics Letters B*, **427** : 7–12 (1998).
- Pethick, C. J., Ravenhall, D. G., Matter at large neutron excess and the physics of neutron star crusts, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.*, **45** : 429–484 (1995).
- Pethick, C. J., Ravenhall, D. G., Lorenz, C. P., The inner boundary of a neutron-star crust, *Nuclear Physics A*, **584** : 675–703 (1995).
- Phillips, J. C., Critical Points and Lattice Vibration Spectra, *Physical Review*, **104** : 1263–1277 (1956).
- Phillips, J. C., Kleinman, L., New Method for Calculating Wave Functions in Crystals and Molecules, *Physical Review*, **116** : 287–294 (1959).
- Prix, R., *Aspects de l'hydrodynamique superfluide des étoiles à neutrons*, Ph.D. thesis, Université Paris XI (2000).
- Prix, R., Variational description of multifluid hydrodynamics : Uncharged fluids, *Phys. Rev. D*, **69(4)** : 043001–+ (2004).
- Prix, R., Comer, G. L., Andersson, N., Inertial modes of non-stratified superfluid neutron stars, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, **348** : 625–637 (2004).
- Prix, R., Rieutord, M., Adiabatic oscillations of non-rotating superfluid neutron stars, *A&A*, **393** : 949–963 (2002).
- Pulci, O., Adolph, B., Grossner, U., Bechstedt, F., Ab initio calculation of the reflectance anisotropy of surfaces : The triangle method, *Phys. Rev. B: Solid State*, **58** : 4721–4727 (1998).
- Rajaraman, R., Bethe, H. A., Three-Body Problem in Nuclear Matter, *Reviews of Modern Physics*, **39** : 745–770 (1967).
- Raubenheimer, L. J., Gilat, G., Accurate Numerical Method of Calculating Frequency Distribution Functions in Solids. II. Extension to hcp Crystals, *Physical Review*, **157** : 586–599 (1967).

- Ravenhall, D. G., Pethick, C. J., Wilson, J. R., Structure of Matter below Nuclear Saturation Density, *Physical Review Letters*, **50** : 2066–2069 (1983).
- Rayet, M., Arnould, M., Paulus, G., Tondeur, F., Nuclear forces and the properties of matter at high temperature and density, *A&A*, **116** : 183–187 (1982).
- Ring, P., Schuck, P., *The nuclear many body problem*, Springer-Verlag, New York (1980).
- Rogan, J., Lagos, M., Non-recursive Chadi-Cohen integration over the Brillouin zone of cubic crystals, *Phil. Mag. B*, **81** : 551–559 (2001).
- Ruderman, M., Neutron star quakes and pulsar periods, *Nature*, **223** : 597 (1969).
- Ruderman, M., Matter in Superstrong Magnetic Fields : The Surface of a Neutron Star, *Physical Review Letters*, **27** : 1306–1308 (1971).
- Ruderman, M., Crust-breaking by neutron superfluids and the VELA pulsar glitches, *ApJ*, **203** : 213–222 (1976).
- Ruderman, M., Zhu, T., Chen, K., Neutron Star Magnetic Field Evolution, Crust Movement, and Glitches, *ApJ*, **492** : 267–+ (1998).
- Sánchez-Pérez, J. V., Caballero, D., Martínez-Sala, R., Rubio, C., Sánchez-Dehesa, J., Meseguer, F., Llinares, J., Gálvez, F., Sound Attenuation by a Two-Dimensional Array of Rigid Cylinders, *Physical Review Letters*, **80** : 5325–5328 (1998).
- Saffren, M. M., Slater, J. C., An Augmented Plane-Wave Method for the Periodic Potential Problem. II, *Physical Review*, **92** : 1126–1128 (1953).
- Salpeter, E. E., Energy and Pressure of a Zero-Temperature Plasma., *ApJ*, **134** : 669–+ (1961).
- Sandulescu, N., van Giai, N., Liotta, R. J., Superfluid properties of the inner crust of neutron stars, *Phys. Rev. C*, **69(4)** : 045802–+ (2004).
- Sapienza, R., Costantino, P., Wiersma, D., Ghulinyan, M., Oton, C. J., Pavesi, L., Optical Analogue of Electronic Bloch Oscillations, *Physical Review Letters*, **91(26)** : 263902–+ (2003).
- Sauls, J. A., Superfluidity in the Interiors of Neutrons Stars, Ogelman, H., van den Heuvel, E., van Paradis, J. (eds.), *Çesme Lectures on "Timing Neutron Stars"*, NATO-ASI, Series C, Vol. 262, April 1988, NATO-ASI, Kluwer Academic Press, pages 441–490 (1989).
- Sawyer, R. F., Condensed π^- Phase in Neutron-Star Matter, *Physical Review Letters*, **29** : 382–385 (1972).
- Scalapino, D. J., π^- Condensate in Dense Nuclear Matter, *Physical Review Letters*, **29** : 386–388 (1972).
- Schaffner, J., Mishustin, I. N., Hyperon-rich matter in neutron stars, *Phys. Rev. C*, **53** : 1416–1429 (1996).
- Schmid, K. W., Mütter, H., Machleidt, R., Meson exchange potentials and the problem of saturation in finite nuclei, *Nuclear Physics A*, **530** : 14–26 (1991).

- Schutz, B. F., Perfect Fluids in General Relativity : Velocity Potentials and a Variational Principle, *Phys. Rev. D*, **2** : 2762–2773 (1970).
- Sedrakian, A., Wasserman, I., The tensor virial method and its application to self gravitating superfluids, Blaschke, D., Glendenning, N. K., Sedrakian, A. (eds.), *LNP Vol. 578 : Physics of Neutron Star Interiors*, ECT*, Springer, pages 97–126 (2001).
- Shapiro, S. L., Teukolsky, S. A., *Black holes, white dwarfs, and neutron stars : The physics of compact objects*, Research supported by the National Science Foundation, New York, Wiley-Interscience, 663 pages (1983).
- Shechtman, D., Blech, I., Gratias, D., Cahn, J. W., Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry, *Physical Review Letters*, **53** : 1951–1953 (1984).
- Shockley, W., The Empty Lattice Test of the Cellular Method in Solids, *Physical Review*, **52** : 866–872 (1937).
- Shoon K Kim, *Group theoretical methods and applications to molecules and crystals*, Cambridge University Press, 492 pages (1999).
- Singh, D. J., *Planewaves, pseudopotentials and the LAPW method*, Kluwer Academic Publisher, Boston, Dordrecht, London, 115 pages (1994).
- Skyrme, T. H. R., *Phil. Mag.*, **1** : 1043 (1956).
- Skyrme, T. H. R., *Nucl. Phys.*, **9** : 615 (1959).
- Slater, J. C., Wave Functions in a Periodic Potential, *Physical Review*, **51** : 846–851 (1937).
- Slater, J. C., A Simplification of the Hartree-Fock Method, *Physical Review*, **81** : 385–390 (1951).
- Slater, J. C., An Augmented Plane Wave Method for the Periodic Potential Problem, *Physical Review*, **92** : 603–608 (1953).
- Stairs, I. H., Lyne, A. G., Shemar, S. L., Evidence for free precession in a pulsar, *Nat.*, **406** : 484–486 (2000).
- Szumlowicz, F., Wendeln, J. K., Tetrahedral subdivision of the irreducible wedge for Brillouin zones of cubic lattices, *Phys. Rev. B: Solid State*, **25** : 2428–2432 (1982).
- Taub, A. H., General Relativistic Variational Principle for Perfect Fluids, *Physical Review*, **94** : 1468–1470 (1954).
- Taut, M., Tangent versus secant tetrahedron method : Application to spectral properties of quasiparticles with finite lifetime, *Phys. Rev. B: Solid State*, **57** : 2217–2221 (1998).
- Taylor, J. H., Stinebring, D. R., Recent progress in the understanding of pulsars, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, **24** : 285–327 (1986).
- Thorsett, S. E., Chakrabarty, D., Neutron Star Mass Measurements. I. Radio Pulsars, *ApJ*, **512** : 288–299 (1999).

- Tokaty, G. A., *A history and philosophy of fluid mechanics*, Dover publications, New York (1994).
- Torreti, R., *Relativity and geometry*, Dover publications, New York, 395 pages (1996).
- Trautman, A., Invariance properties and conservation laws, Trautman, A., Pirani, F. A. E., Bondi, H. (eds.), *Brandeis lectures on general relativity*, Preston Hall, New Jersey, pages 158–200 (1965).
- Trautman, A., Comparison of Newtonian and relativistic theories of space-time, *Perspectives in geometry and relativity*, pages 413–425 (1966).
- Unruh, W. G., Sonic analogue of black holes and the effects of high frequencies on black hole evaporation, *Phys. Rev. D*, **51** : 2827–2838 (1995).
- van Hove, L., The Occurrence of Singularities in the Elastic Frequency Distribution of a Crystal, *Physical Review*, **89** : 1189–1193 (1953).
- van Kolck, U., Few-nucleon forces from chiral Lagrangians, *Phys. Rev. C*, **49** : 2932–2941 (1994).
- Vautherin, D., Brink, D. M., Hartree-Fock Calculations with Skyrme’s Interaction. I. Spherical Nuclei, *Phys. Rev. C*, **5** : 626–647 (1972).
- Vidaña, I., Polls, A., Ramos, A., Engvik, L., Hjorth-Jensen, M., Hyperon-hyperon interactions and properties of neutron star matter, *Phys. Rev. C*, **62(3)** : 035801–+ (2000).
- Walecka, J. D., A Theory Of Highly Condensed Matter, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **83** : 491 (1974).
- Walter, F. M., Matthews, L. D., The optical counterpart of the isolated neutron star RX J185635-3754, *Nature*, **389** : 358–360 (1997).
- Walter, F. M., Wolk, S. J., Neuhauser, R., Discovery of a nearby isolated neutron star, *Nature*, **379** : 233–235 (1996).
- Wang, N., Manchester, R. N., Pace, R. T., Bailes, M., Kaspi, V. M., Stappers, B. W., Lyne, A. G., Glitches in southern pulsars, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, **317** : 843–860 (2000).
- Wang, N., Manchester, R. N., Zhang, J., Wu, X. J., Yusup, A., Lyne, A. G., Cheng, K. S., Chen, M. Z., Pulsar timing at Urumqi Astronomical Observatory : observing system and results, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, **328** : 855–866 (2001).
- Watanabe, G., Sato, K., Yasuoka, K., Ebisuzaki, T., Structure of cold nuclear matter at subnuclear densities by quantum molecular dynamics, *Phys. Rev. C*, **68(3)** : 035806–+ (2003).
- Weber, F., *Pulsars as astrophysical laboratories for nuclear and particle physics*, IOP Publishing, Bristol, Great Britain (1999).
- Weinberg, S., Phenomenological Lagrangians, *Physica A Statistical Mechanics and its Applications*, **96** : 327–340 (1979).

- Weinberg, S., What is quantum field theory, and what did we think it is?, *Boston 1996, conceptual foundations and quantum field theory*, Boston university, page 241 (1996).
- Weisberg, J. M., Taylor, J. H., The Relativistic Binary Pulsar B1913+16, *ASP Conf. Ser. 302 : Radio Pulsars*, pages 93–+ (2003).
- Wheeler, J. A., Superdense Stars, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, **4** : 393–+ (1966).
- Wiesenekker, G., Baerends, E. J., Quadratic integration over the three dimensional Brillouin zone, *Journal of Physics : Condensed Matter*, **3** : 6721–6742 (1991).
- Wiesenekker, G., te Velde, G., Baerends, E. J., Analytic quadratic integration over the two-dimensional Brillouin zone , *Journal of Physics C Solid State Physics*, **21** : 4263–4283 (1988).
- Wigner, E., Seitz, F., On the Constitution of Metallic Sodium, *Physical Review*, **43** : 804–810 (1933).
- Williams, R. D., Koonin, S. E., Sub-saturation phases of nuclear matter, *Nuclear Physics A*, **435** : 844–858 (1985).
- Wiringa, R. B., From deuterons to neutron stars : variations in nuclear many-body theory, *Reviews of Modern Physics*, **65** : 231–242 (1993).
- Wiringa, R. B., Fiks, V., Fabrocini, A., Equation of state for dense nucleon matter, *Physical Review C*, **38** : 1010–1037 (1988).
- Witten, E., Cosmic separation of phases, *Phys. Rev. D*, **30** : 272–285 (1984).
- Woltjer, L., A theorem on force free magnetic fields, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **44** : 489–491 (1958).
- Wong, T., Backer, D. C., Lyne, A. G., Observations of a Series of Six Recent Glitches in the Crab Pulsar, *ApJ*, **548** : 447–459 (2001).
- Woodruff, T. O., The orthogonalized plane-wave method, *Solid state physics*, Academic press, Inc., New York, pages 367–411 (1957).
- Yano, K., *Theory of Lie derivatives*, North Holland, Amsterdam (1955).
- Yoshida, S., Lee, U., Inertial modes of neutron stars with a superfluid core, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.*, **344** : 207–222 (2003a).
- Yoshida, S., Lee, U., r-modes in relativistic superfluid stars, *Phys. Rev. D*, **67(12)** : 124019–+ (2003b).
- Young, M. D., Manchester, R. N., Johnston, S., A radio pulsar with an 8.5-second period that challenges emission models., *Nat.*, **400** : 848–849 (1999).
- Zaharioudakis, D., Tetrahedron methods for Brillouin zone integration, *Computer Physics Communications*, **157** : 17–31 (2004).

Ce travail traite des aspects macroscopiques et microscopiques de l'écorce interne d'une étoile à neutrons, formée d'un solide de noyaux plongé dans un superfluide de neutrons. Une première partie expose une formulation quadridimensionnelle covariante de l'hydrodynamique non relativiste d'un mélange de fluides parfaits, basée sur un principe variationnel convectif. Ce formalisme est appliqué à la description de l'écorce, comme un mélange de deux fluides, un superfluide de neutrons et un plasma de noyaux et d'électrons, couplés par un entraînement non dissipatif. La seconde partie est dédiée à l'étude microscopique de cet entraînement. Appliquant des méthodes de champ moyen au-delà de l'approximation de Wigner-Seitz, nous montrons que cet entraînement résulte de la diffraction de Bragg des neutrons libres sur les noyaux. Celle-ci se traduit par une masse de neutron effective « mésoscopique », qui, contrairement à la masse effective « microscopique », est très grande devant la masse « nue » dans les couches intermédiaires.

Spécialité : Physique Théorique

Mots-Clés

Etoiles à neutrons, Pulsars, Entraînement, Superfluidité, Hydrodynamique, Modèle à deux fluides, Espace-temps de Newton-Cartan, Physique nucléaire, Physique du solide, Théorie des bandes, Hartree-Fock.

**Laboratoire de l'Univers et de ses Théories,
Observatoire de Paris-Meudon,
5, place Jules Janssen, 92195 Meudon Cedex France**