



HAL
open science

La Densité de niveaux du Problème à N-corps

Jerome Roccia

► **To cite this version:**

Jerome Roccia. La Densité de niveaux du Problème à N-corps. Physique mathématique [math-ph].
Université Paris Sud - Paris XI, 2007. Français. NNT: . tel-00176867

HAL Id: tel-00176867

<https://theses.hal.science/tel-00176867>

Submitted on 4 Oct 2007

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.

UNIVERSITE DE PARIS XI – U.F.R. DES SCIENCES D'ORSAY

Thèse de doctorat de l'Université Paris 11

Spécialité :
Physique Théorique

présentée par
Jérôme ROCCIA

pour obtenir le grade de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS 11

Sujet :
Densité de Niveaux
du Problème à N-Corps

Soutenue le 26 Septembre 2007
devant le jury composé de

M. Sven Åberg	<i>Examineur</i>
M. Stephen C. Creagh	<i>Rapporteur</i>
M. Henk Hilhorst	<i>Examineur</i>
M. Patricio Leboeuf	<i>Directeur de thèse</i>
M. Achim Richter	<i>Examineur</i>
M. Hans A. Weidenmüller	<i>Rapporteur</i>

Remerciements

Je tiens à remercier en premier lieu Patricio Leboeuf pour avoir accepté et encadré la thèse avec beaucoup de patience, de confiance et de sympathie.

Je tiens aussi à remercier Stephen C. Creagh et Hans Weidenmüller d'avoir accepté la responsabilité de rapporter cette thèse. Je remercie aussi Achim Richter pour avoir apporté un point de vue expérimental sur les travaux de la thèse. Enfin je remercie Sven Aberg et Henk Hilhorst d'avoir accepté de faire partie des membres du jury.

Je remercie aussi les thésards de mon bureau avec lesquels j'ai passé de très bons moments durant ces trois dernières années : Brice, Mélanie, Nicolas, Thierry (qui n'était pas dans le bureau mais c'est tout comme) et Yacine. Je remercie aussi Benjamin et Michel pour leur sympathie et pour m'avoir aidé à régler des problèmes informatiques. Vous m'avez ouvert les yeux sur de nombreuses choses et je vous en suis très reconnaissant. Je remercie aussi les membres du LPTMS et de l'IPN pour leur gentillesse, qui m'auront permis de bénéficier de conditions de travail excellentes.

Enfin, je souhaite remercier Véronique d'être là, pour m'avoir soutenue durant les moments difficiles et pour son merveilleux coup de crayon. Mes plus grands remerciements vont à ma famille pour la confiance qu'ils m'ont toujours apportée et surtout mes parents pour m'avoir donné la possibilité d'une émancipation heureuse.

Table des matières

Remerciements	3
Introduction	7
I Densité de niveaux à une particule	11
1 La théorie de Thomas-Fermi	13
2 Fluctuations de la densité de niveaux à une particule	19
II L'énergie du fondamental d'un gaz de Fermi	27
3 Cas nucléaire, le modèle de la goutte liquide	29
4 Modèle théorique	33
III Densité de niveaux du problème à N-corps	55
5 Cadre général	57
6 Equivalence bosons-fermions	61
7 Partie lisse pour différents régimes de température	65
7.1 Régime basse température pour les bosons	66

7.2	Régime basse température pour les fermions	66
7.3	Régime intermédiaire pour les fermions	68
7.4	Régime haute température	69
8	Système à nombre fini de particules	71
8.1	Cas des bosons	71
8.2	Cas des fermions	72
9	Système réaliste, régime basse température	75
9.1	Partie lisse	78
9.2	Partie oscillante	82
9.3	Comparaison entre la théorie et le numérique	91
10	Régime haute température : partie fluctuante	95
11	Partie oscillante à basse température : cas des bosons	99
	Conclusion et Perspectives	103
	Annexes	107
A	Calcul de $p_2(n)$	109
B	Etude du spectre de l'oscillateur harmonique 3D	115
C	$\tilde{\mathcal{E}}(\mu, T)$ pour un gaz de fermions à basse température	119
	Bibliographie	123

Introduction

La densité de niveaux du problème à N-corps ρ_{MB} intéresse depuis longtemps les physiciens. Dans un premier temps elle fut étudiée dans le domaine nucléaire par Bethe [1]. Par la suite la physique des particules et l'astrophysique pour connaître le taux des réactions thermonucléaires dans les processus stellaires, s'y sont intéressées [2]. L'approche statistique du comportement des niveaux excités a été une source d'intérêt pendant de nombreuses années. Une des propriétés statistiques de base de ces niveaux est leur densité, pour laquelle le gaz de Fermi et les modèles à température constante sont souvent utilisés avec des paramètres d'entrée obtenus à partir de données expérimentales [3]. Ainsi pour des échelles d'énergie grandes comparées à l'espacement moyen de niveaux à une particule, mais petites comparées à l'énergie de Fermi du système, la densité de niveaux est donnée par la formule de Bethe [1] qui croît comme $e^{a\sqrt{Q}}$ où Q est l'énergie d'excitation. Le paramètre a dans l'exposant est proportionnel à la densité de niveaux à une particule à l'énergie de Fermi. Mais la valeur expérimentale de a n'est pas en très bonne adéquation avec les modèles simples que Bethe a proposés. La figure 1 donne le comportement de a en fonction du nombre de masse A . On a tracé la valeur de a dans le modèle simple de gaz de Fermi uniforme [4]. On remarque qu'en plus de la mauvaise estimation de la moyenne de a expérimental, les oscillations en fonction de A ne sont pas reproduites. C'est à ce genre de problèmes que nous allons nous intéresser dans cette thèse.

Pour cela nous étudierons des systèmes de fermions ou de bosons avec des interactions de type champ moyen. Nous verrons qu'un grand nombre des propriétés fondamentales de ρ_{MB} , comme les effets de couches et les effets de taille finie, reproduisent en bonne partie les données expérimentales notamment en physique nucléaire [5]. Bien sûr aujourd'hui de nombreux modèles proposent de bonnes descriptions des données expérimentales; on citera notamment les modèles de type Back-shifted [6], le modèle "*HF-BCS*" [7] basé sur une approche Hartree-Fock de la densité de niveaux. Néanmoins ces modèles reposent soit sur des bases largement phénoménologiques, soit

ils font recours à de lourds calculs numériques. Il est alors difficile d'avoir une compréhension analytique et cohérente du système. De plus des expressions semiclassiques de la densité de niveaux ont été proposé dans [8, 9] mais elles restent encore difficiles à exploiter.

Ainsi le travail réalisé dans cette thèse a surtout été d'éclaircir et d'unifier les différents comportements de la densité de niveaux en température et en nombre de particules à partir d'un nombre minimal de concepts.

Le traitement de ρ_{MB} par la méthode du point de col nous fera constater que l'énergie du fondamental du système est un élément essentiel pour comprendre ρ_{MB} . Notamment la moyenne (resp. les oscillations) de a en fonction de A dépend de la moyenne (resp. des oscillations) de l'énergie du fondamental. Comme cette dernière quantité est engendrée par la densité de niveaux à une particule ρ , le début de cette thèse s'ouvre donc sur son étude.

Nous y développons la théorie selon laquelle celle-ci se décompose en une partie régulière ou lisse décrite par les théories de type Thomas-Fermi [10] ou Weyl [11], et d'une partie oscillante décrite par la théorie des orbites périodiques [12, 13]. La statistique du système, régulière ou chaotique, sera étudiée de près et un rapprochement, *via* la fonction de corrélation à deux points, avec la théorie des matrices aléatoires sera présentée.

La deuxième partie est consacrée à l'énergie du fondamental pour des systèmes isolés. Nous l'aborderons par l'exemple classique de la goutte liquide. Ensuite nous verrons qu'un traitement microcanonique est alors indispensable pour avoir la bonne expression de la valeur moyenne de l'énergie du fondamental et de ses oscillations en fonction du nombre de particules. Les cas des systèmes à potentiels fixes ou auto-cohérents seront discutés [39, 40].

Ainsi grâce aux deux premières parties, la troisième appréhendera les multiples comportements de ρ_{MB} pour divers régimes limites en température et en nombre de particules. Nous verrons alors comment les problèmes de moyenne et d'oscillations de a discutés plus haut trouveront des réponses [5]. Ce sera aussi l'occasion d'aborder des points fondamentaux mais qui n'ont été que peu étudiés jusqu'ici. Nous nous intéresserons notamment aux effets d'un nombre fini de particules sur ρ_{MB} *via* les problèmes de combinatoire et *via* la théorie des nombres. Nous étudierons ensuite le comportement de la densité de niveaux pour des systèmes de bosons et pour des températures grandes par rapport à l'énergie d'excitation.

Finalement une conclusion sur le travail réalisé dans cette thèse sera proposée. Nous discuterons aussi les perspectives d'une amélioration des modèles exposés et des précisions à apporter sur certains résultats.

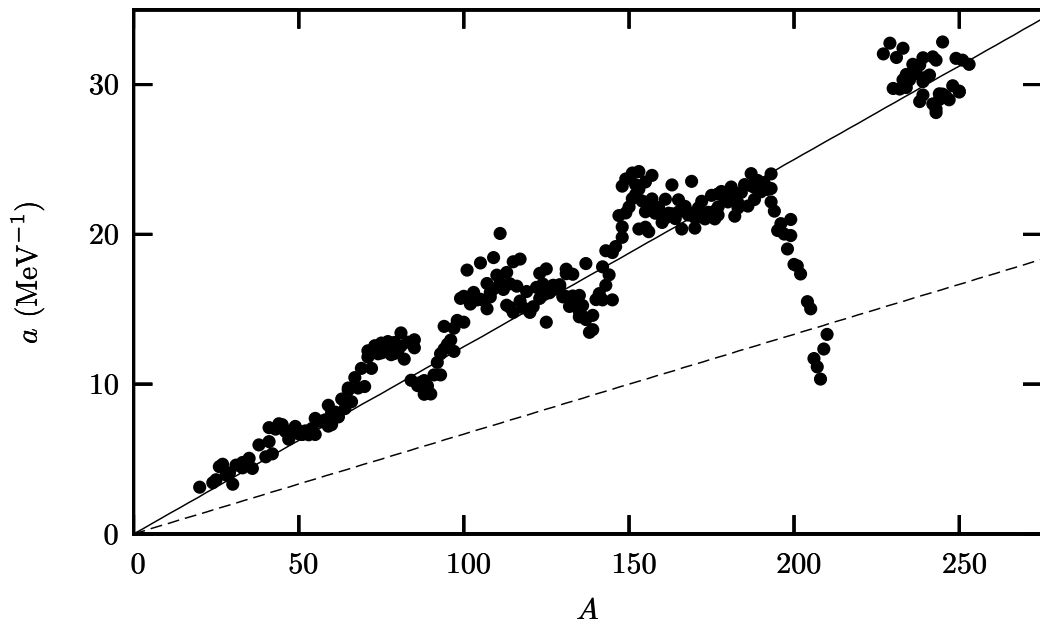


FIG. 1 – Le paramètre a en fonction du nombre de masse A à l'énergie de liaison des neutrons. Les points représentent les données expérimentales tirées de [14]. Le trait continu est un fit linéaire de a expérimental : $a = A/8$ (MeV^{-1}). En pointillés est représentée la valeur de $a = A/15$ (MeV^{-1}) pour un gaz de Fermi uniforme [4].

Première partie

Densité de niveaux à une particule

Chapitre 1

La théorie de Thomas-Fermi

Il existe de nombreuses méthodes qui sont utilisées pour traiter du problème à N-corps et qui nous permettent de comprendre un grand nombre de faits expérimentaux. Généralement ce sont des calculs numériques très poussés qui nous donnent ce type d'informations. Néanmoins il est aussi souhaitable d'avoir une compréhension qualitative des phénomènes étudiés. La théorie de Thomas-Fermi permet de poser les bases des expressions semiclassiques des grandeurs thermodynamiques moyennées. En physique nucléaire, elle ne fut pas très exploitée après son invention car on considérait qu'elle ne décrivait pas bien les systèmes à N-corps qui ont des interactions de courtes portées. Cette approche ressemble assez naturellement à la méthode de lissage de type Strutinsky pour l'énergie du système [15]. La théorie de Thomas-Fermi et ses extensions sont un traitement semiclassique de systèmes de particules en interaction. Ces interactions sont approchées par un potentiel de champ moyen agissant sur une particule.

Considérons donc un hamiltonien à une particule :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V, \quad H\varphi_n = \epsilon_n\varphi_n. \quad (1.1)$$

où le potentiel V peut être décrit par le potentiel auto-cohérent Hartree-Fock et m est la masse des fermions.

Soit le propagateur à une particule

$$C^t = e^{-iHt/\hbar} \quad (1.2)$$

qui est solution de l'équation de Schrödinger,

$$\int d^3r'' \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') - H(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \right) C^t(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = 0, \quad (1.3)$$

avec comme condition initiale :

$$C^{t=0}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (1.4)$$

Avec l'équation (1.1) le propagateur s'écrit comme :

$$C^\beta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}) \varphi_n^*(\mathbf{r}') e^{-\beta \epsilon_n} , \quad (1.5)$$

où $\beta = it/\hbar$. Or la densité spectrale

$$\rho_\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \delta(\epsilon - H) | \mathbf{r}' \rangle = \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}) \varphi_n^*(\mathbf{r}') \delta(\epsilon - \epsilon_n) \quad (1.6)$$

peut être reformulée en fonction du propagateur comme suit :

$$\rho_\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{2}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{\epsilon\beta} C^\beta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\beta . \quad (1.7)$$

La constante c est choisie de telle sorte qu'elle soit plus grande que l'indice de sommabilité de $C^\beta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ par rapport à la variable β .

La densité de niveaux à une particule ρ vaut alors :

$$\rho(\epsilon) = Tr \delta(\epsilon - H) = \frac{1}{\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{\epsilon\beta} Tr[C^\beta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] d\beta , \quad (1.8)$$

où $Tr[f(x, x')] = \int f(x', x') dx'$ est appelée la trace de f .

L'approximation de Thomas-Fermi consiste à faire un développement de Taylor du potentiel V autour d'une valeur centrale \mathbf{r}_0 .

On résout l'équation (1.3) à l'ordre le plus bas pour le potentiel. On obtient alors le propagateur :

$$C^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{\beta^{3/2}} e^{-(m/2\hbar^2\beta)(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2 - \beta V(\mathbf{r}_0)} . \quad (1.9)$$

Comme ce développement est valable pour une valeur quelconque de \mathbf{r}_0 , on choisit $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}'$. En remplaçant l'équation (1.9) dans l'équation (1.8), on obtient la densité de niveaux dans l'approximation de Thomas-Fermi :

$$\rho_{TF}(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int d^3r (\epsilon - V(\mathbf{r}))^{1/2} \Theta(\epsilon - V(\mathbf{r})) , \quad (1.10)$$

où Θ est la fonction de Heaviside.

Ce dernier résultat est équivalent à l'expression

$$\rho_{TF}(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r d^3p \delta[E - H(\mathbf{r}, \mathbf{p})].$$

Une autre méthode pour calculer ρ consiste à développer la transformée de Wigner du propagateur en fonction de \hbar (Wigner-Kirkwood Expansion) [16, 17, 10, 18]. Nous ne nous attarderons pas sur sa description mais nous pouvons dire qu'à l'ordre le plus bas de cette théorie nous retrouvons la même expression de ρ_{TF} . Cette description sera suffisante pour la suite de l'exposé.

L'approximation de Thomas-Fermi décrit seulement la partie moyenne de la densité de niveaux à une particule. En effet, ρ est par définition discontinue, le développement de Taylor de (1.8) n'autorise que des termes continus de ρ . Remarquons aussi que cette approximation n'est valable que pour des potentiels développables en série de Taylor (potentiel lisse). Bien que nous utiliserons ces derniers, nous étudierons aussi des potentiels à bords durs. Lorsque ceux-ci sont nuls à l'intérieur d'un domaine et infinis sur la paroi, on parle alors de billards. Dans ce cas la partie moyenne de la densité de niveaux à une particule est décrite par la série de Weyl [11]. Celle-ci se décompose en série de termes fonction des paramètres géométriques du système. Pour des billards à 3 dimensions on a généralement :

$$\rho_{Weyl}(\epsilon) = \frac{V}{4\pi^2} \epsilon^{1/2} - \frac{S}{16\pi} + \frac{L}{32\pi} \epsilon^{-1/2} . \quad (1.11)$$

Avec V le volume du billard, S sa surface et L est liée à la courbure de la frontière et à sa topologie. Comme la série de Weyl décrit aussi la partie lisse de la densité de niveaux à une particule, on simplifie les notations en utilisant indifféremment $\bar{\rho}$ pour la partie moyenne de la densité de niveaux à une particule provenant de l'approximation de Thomas-Fermi dans le cas de potentiels lisses ou de la série de Weyl pour des billards. On a donc :

$$\rho_{TF} = \bar{\rho} \text{ et } \rho_{Weyl} = \bar{\rho} . \quad (1.12)$$

Une quantité qui nous sera utile par la suite est la fonction densité de niveaux cumulée à température nulle :

$$\mathcal{N}(\mu) = \int_0^\mu d\epsilon \rho(\epsilon) , \quad (1.13)$$

où μ est le potentiel chimique. La partie Thomas-Fermi (ou Weyl) de \mathcal{N} est donnée par :

$$\bar{\mathcal{N}}(\mu) = \int_0^\mu d\epsilon \bar{\rho}(\epsilon) . \quad (1.14)$$

Pour fixer les idées nous donnons les expressions de $\bar{\mathcal{N}}$ pour l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions (ISO HO 3D) et pour un billard

sphérique [13] :

$$\bar{\mathcal{N}}(\mu) = \frac{1}{3}(\mu/\hbar\omega)^3 - \frac{1}{12}(\mu/\hbar\omega), \text{ pour ISO HO 3D} \quad (1.15)$$

$$\bar{\mathcal{N}}(\mu) = \frac{2}{9\pi}(\mu/E_0)^{3/2} - \frac{1}{4}(\mu/E_0) + \frac{2}{3\pi}(\mu/E_0)^{1/2}, \text{ pour la sphère} \quad (1.16)$$

où ω est la fréquence de l'oscillateur harmonique isotrope. $E_0 = \hbar^2/2mr_0^2$, où r_0 est le rayon de la sphère. Ainsi d'après la figure (1.1) on s'aperçoit que l'estimation de la densité de niveaux cumulée n'est précise qu'en moyenne. L'aspect purement quantique du saut de la fonction \mathcal{N} est entièrement absent de cette théorie. Ceci est un phénomène général pour ce type de méthode. Il en va de même pour toutes les quantités thermodynamiques du système (énergie, densité de niveaux à N-corps, force ...).

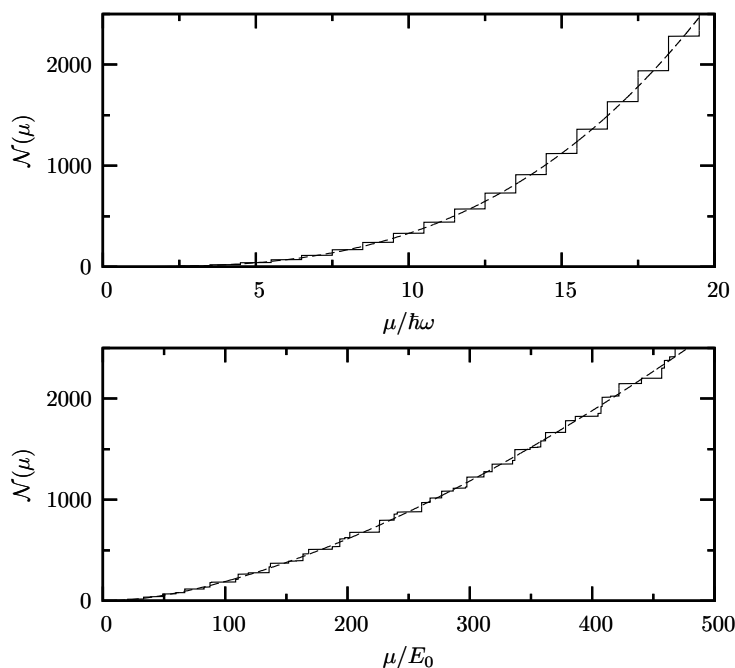


FIG. 1.1 – Panneau du haut : Densité de niveaux cumulée pour l'oscillateur harmonique isotrope 3D. Le trait plein représente la valeur exacte. Le trait en pointillé correspond à l'équation (1.15). Panneau du bas : Densité de niveaux cumulée pour le billard sphérique. Le trait plein représente la valeur exacte. Le trait en pointillé correspond à l'équation (1.16).

Nous soulignons que le potentiel chimique est traité de manière continue, en cela les propriétés de moyenne des grandeurs Thomas-Fermi ne sont

valables que pour des systèmes grand canonique. Nous verrons dans les deux autres parties de cette thèse que pour les systèmes microcanoniques, l'expression de la moyenne des quantités thermodynamiques n'est qu'en partie donnée par la théorie de Thomas-Fermi.

Chapitre 2

Fluctuations de la densité de niveaux à une particule

Une meilleure compréhension théorique de la densité de niveaux à une particule a été élaborée à partir de techniques semiclassiques développées dans le domaine du chaos quantique par Gutzwiller [19, 12]; par Balian et Bloch [20] et par Berry et Tabor [21, 22] pour les systèmes intégrables. Pour cela on utilise comme point de départ une décomposition de la densité de niveaux à une particule en deux parties : une partie moyenne donnée par la théorie de Thomas-Fermi (ou Weyl) $\bar{\rho}$ et une partie oscillante donnée par la théorie des orbites périodiques $\tilde{\rho}$:

$$\tilde{\rho}(\epsilon) = \rho(\epsilon) - \bar{\rho}(\epsilon) = \sum_{op} A_{op}(\epsilon) \cos(S_{op}(\epsilon)/\hbar + \nu_{op}) . \quad (2.1)$$

op désigne les orbites périodiques classiques du système. La somme doit se faire sur toutes les orbites périodiques du système pour une énergie ϵ donnée. S_{op} est l'action classique donnée par $S_{op}(\epsilon) = \oint \mathbf{p}d\mathbf{q}$ où l'intégrale de contour est effectuée le long de l'orbite. Sa dérivée par rapport à l'énergie

$$\tau_{op}(\epsilon) = \frac{dS_{op}}{d\epsilon} \quad (2.2)$$

est la période de l'orbite. La phase ν_{op} est appelée indice de Maslov. Celui-ci est relié aux propriétés topologiques de l'orbite : par exemple le nombre de rebonds dans un billard ou les caustiques. L'amplitude A_{op} est liée aux propriétés de stabilité de l'orbite périodique. On remarque que cette expression est loin d'être triviale. En effet, alors que le système est fondamentalement quantique, la densité de niveaux est fonction de variables classiques du système. Cela vient du fait que si on applique la méthode de la phase stationnaire

Chapitre 2. Fluctuations de la densité de niveaux à une particule

20

à ρ , la contribution principale est donnée par les orbites périodiques. L'expression explicite de l'amplitude dépend de la nature de la dynamique du système. Pour les systèmes intégrables, une manière naturelle de représenter A_{op} est de l'exprimer dans la base des variables d'action.

Un système est dit intégrable s'il possède d constantes du mouvement *en involution* et indépendantes, où d est le nombre de degrés de liberté du système [22, 13]. En terme de crochet de Poisson cela signifie que chaque constante du mouvement commute avec l'hamiltonien et avec les autres constantes. Ainsi les trajectoires seront confinées sur une surface à d dimensions dans l'espace des phases à $2d$ dimensions. On obtient alors une base orthogonale de vecteurs tangents à cette surface qui dépendent du vecteur position \mathbf{q} et du vecteur quantité de mouvement \mathbf{p} . Un théorème de topologie (Poincaré-Hopf) affirme alors que cette surface est un tore à d dimensions [23, 22].

On fait la transformation canonique $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \rightarrow (\boldsymbol{\theta}, \mathbf{I})$, où $\boldsymbol{\theta}$ sont les coordonnées cycliques telles que :

$$\oint \mathbf{I} d\boldsymbol{\theta} = 2\pi \mathbf{I} = \oint \mathbf{p} d\mathbf{q} . \quad (2.3)$$

\mathbf{I} sont les constantes du mouvement du système. On peut montrer que l'hamiltonien du système ne dépend que de ces constantes. A chaque I_j correspond une variable angulaire θ_j qui évolue linéairement avec le temps, avec comme fréquence caractéristique $\omega_j = \partial H / \partial I_j$. Celles-ci sont reliées à la fréquence de rotation propre à chaque dimension du tore. Si le rapport de ces fréquences est rationnel, il existe toujours un nombre fini de tours pour lequel la trajectoire se referme. Ces trajectoires vont donner les contributions principales à ρ .

Les orbites périodiques s'obtiennent donc lorsqu'on impose la commensurabilité de ces fréquences $\omega_j(I_1, \dots, I_d) = 2\pi m_j / \tau$, où $\{m_j\}$ sont des nombres entiers relatifs. Chaque solution possible fixe la période τ de l'orbite correspondante. Si les nombres $\{m_j\}$ n'ont pas de diviseur commun, il s'agit d'une orbite périodique primitive. Dans le cas contraire, il s'agit d'une orbite répétée. Les nombres $\{m_j\}$ remplacent les indices symboliques "op" dans le classement des orbites.

D'après le travail de Berry et Tabor [21], on sait que pour un système intégrable à d dimensions, l'amplitude de la formule semiclassique est

$$A_{m_j}^2(\epsilon) = \frac{4 \cdot (2\pi)^{d-1}}{\hbar^{d+1} \tau_{m_j}^d \left| \det \{ \partial \omega_j / \partial I_k \}_{m_j} \sum_j \omega_j \partial I_j / \partial \tau_{m_j} \right|} , \quad (2.4)$$

où l'indice j désigne l'orbite primitive associée à la famille j . La période, les fréquences et les dérivées correspondantes sont calculées à l'énergie ϵ .

Dans le cas d'un système chaotique, la seule quantité conservée est l'énergie. Elle définit une surface de dimensions $2d - 1$ dans l'espace des phases. La caractéristique principale de ce type de système est que chaque orbite périodique se trouve sur cette surface, elles sont toutes isolées et instables (sauf certains cas particuliers comme le billard en forme de stade). La dynamique dans l'espace des phases transversales à une orbite, et pour un petit écart par rapport à celle-ci, est déterminée par linéarisation des équations du mouvement. Dans l'espace transversal à $2d - 2$ dimensions, la matrice de monodromie

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \dot{q}_1}{\partial q_1} & \cdots & \frac{\partial \dot{q}_1}{\partial q_{d-1}} & \frac{\partial \dot{q}_1}{\partial p_1} & \cdots & \frac{\partial \dot{q}_1}{\partial p_{d-1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \dot{q}_{d-1}}{\partial q_1} & \cdots & \frac{\partial \dot{q}_{d-1}}{\partial q_{d-1}} & \frac{\partial \dot{q}_{d-1}}{\partial p_1} & \cdots & \frac{\partial \dot{q}_{d-1}}{\partial p_{d-1}} \\ \frac{\partial \dot{p}_1}{\partial q_1} & \cdots & \frac{\partial \dot{p}_1}{\partial q_{d-1}} & \frac{\partial \dot{p}_1}{\partial p_1} & \cdots & \frac{\partial \dot{p}_1}{\partial p_{d-1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \dot{p}_{d-1}}{\partial q_1} & \cdots & \frac{\partial \dot{p}_{d-1}}{\partial q_{d-1}} & \frac{\partial \dot{p}_{d-1}}{\partial p_1} & \cdots & \frac{\partial \dot{p}_{d-1}}{\partial p_{d-1}} \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

gouverne le mouvement du système dans le voisinage de l'orbite périodique. Toutes les dérivées sont prises à un point de l'orbite périodique. Nous soulignons le fait qu'il n'existe pas de chaos dans un système conservatif unidimensionnel. La dimension la plus petite de la matrice de monodromie est donc égale à deux pour un système chaotique bidimensionnel. Pour des systèmes chaotiques, la diagonalisation de la matrice de monodromie, qui est une matrice hermitienne à cause de la structure hamiltonienne de l'espace des phases, donne un sous-espace où la dynamique est instable (l'orbite perturbée s'éloigne exponentiellement de l'orbite périodique). Les valeurs propres réelles s'écrivent comme $\pm e^{\lambda_i}$, où les λ_i sont les exposants de Lyapounov. Leur somme (de $i=1$ à $2d - 2$) est nulle car la matrice de monodromie a un déterminant égal à ± 1 . Gutzwiller a démontré que le préfacteur A_{op} pour une orbite instable est donné par :

$$A_{op}(\epsilon) = \frac{\tau_{op}}{\pi \hbar \sqrt{|\det(M_{op} - I)|}}. \quad (2.6)$$

Le préfacteur dépend explicitement de la matrice de monodromie M_{op} . I désigne la matrice identité.

Dans le cas où le système est intégrable, le nombre d'orbites périodique croît comme une puissance finie de l'énergie, tandis que dans les systèmes

chaotiques leur nombre croît exponentiellement. La formule semiclassique (2.1) est l'ordre principal d'un développement en puissance de \hbar . Celle-ci sera suffisante pour nos calculs car nous placerons toujours dans le régime où $\epsilon \gg \hbar^2/(2mL^2)$ où L est la dimension typique du système.

Chaque orbite périodique possède une échelle caractéristique d'énergie $\delta E_p = h/\tau_p$, qui fait varier la phase de 2π .

Une échelle de temps naturelle pour le système est celle qui correspond à la densité moyenne de niveaux pour une énergie ϵ donnée : $\tau_H = \bar{\rho}h$. Elle est appelée le temps de Heisenberg.

L'autre échelle de temps pertinente est celle qui correspond à l'orbite périodique la plus courte τ_{\min} . C'est elle qui donnera l'échelle de grandeur maximale des oscillations de ρ . Le pendant énergétique est donné par

$$E_{\min} = h/\tau_{\min}. \quad (2.7)$$

Nous allons voir que ces deux temps caractéristiques donnent les différents régimes typiques de la fonction de corrélation à 2 points.

Par définition celle-ci est égale à :

$$\mathcal{C}(x, y) = \langle \rho(x + y/2)\rho(x - y/2) \rangle_x. \quad (2.8)$$

La moyenne en énergie x se fait dans une fenêtre Δx telle que :

$$E_{\min} \ll \Delta x \ll x. \quad (2.9)$$

On décompose alors la densité de niveaux d'après l'équation (2.1). La partie Thomas-Fermi de ρ donne une contribution triviale à $\mathcal{C}(x, y)$. Les produits des termes lisse et oscillant donne une contribution nulle car par définition la valeur moyenne de $\tilde{\rho}$ est nulle. On étudiera donc seulement la contribution oscillante de la fonction de corrélation à 2 points :

$$\tilde{\mathcal{C}}(x, y) = \left\langle \tilde{\rho}(x + y/2)\tilde{\rho}(x - y/2) \right\rangle_x. \quad (2.10)$$

Sa transformée de Fourier est donnée par :

$$\mathcal{K}(x, t) = 2\pi\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\mathcal{C}}(x, y)e^{iyt/\hbar} dy. \quad (2.11)$$

Elle est appelée le facteur de forme. Grâce à la théorie semiclassique nous allons évaluer ces deux dernières fonctions. Ainsi d'après les équations (2.1) et (2.10) on obtient la somme double suivante :

$$\tilde{\mathcal{C}}(x, y) = \left\langle \sum_{op, op'} A_{op}(x+y/2)A_{op'}(x-y/2) \cos(S_{op}(x+y/2)/\hbar) \cos(S_{op'}(x-y/2)/\hbar) \right\rangle. \quad (2.12)$$

On a inclus l'indice de Maslov dans l'action. On développe le produit des cosinus pour obtenir des phases fonctions de la somme et de la différence des actions. A cette échelle on considère les termes d'amplitudes comme constants. De plus, l'approximation linéaire des actions est suffisante et donne :

$$S_{op}(x \pm y/2) = S_{op}(x_0) + \tau_{op}(x_0)(x - x_0) \pm \tau_{op}(x_0)y/2 . \quad (2.13)$$

Ainsi le terme de somme des actions est

$$\left\langle \cos \left(\frac{S_{op}(x + y/2) + S_{op'}(x + y/2)}{\hbar} \right) \right\rangle = \left\langle \cos \left(\frac{S_{op} + S_{op'}}{\hbar} + \frac{\tau_{op} + \tau_{op'}}{\hbar}(x - x_0) + \frac{\tau_{op} - \tau_{op'}}{\hbar}y/2 \right) \right\rangle . \quad (2.14)$$

L'existence d'une échelle de temps pour les plus courtes orbites donne une minoration de la phase $\phi = \frac{(\tau_{op} + \tau_{op'})\Delta x}{\hbar}$:

$$\phi > 2\tau_{\min}\Delta x/\hbar = 4\pi\Delta x/E_{\min} . \quad (2.15)$$

D'après l'équation (2.9) la phase est toujours très grande, par conséquent le terme (2.14) est nul. Donc seul le terme de différence des actions est pertinent. $\tilde{\mathcal{C}}(x, y)$ vaut donc

$$2 \left\langle \sum_{op, op'} A_{op}A_{op'} \cos \left(\frac{S_{op} - S_{op'}}{\hbar} + \frac{\tau_{op} - \tau_{op'}}{\hbar}(x - x_0) + \frac{\tau_{op} + \tau_{op'}}{\hbar}y/2 \right) \right\rangle . \quad (2.16)$$

Si on suppose que $y \ll \Delta x$, les termes dominants de $\tilde{\mathcal{C}}(x, y)$ sont donnés par ceux qui ont le facteur $|\tau_{op} - \tau_{op'}|/\hbar$ le plus petit possible. Pour cela on doit donc avoir

$$\tau_{op} \approx \tau_{op'} . \quad (2.17)$$

Le facteur de forme s'écrit alors comme [24] :

$$\mathcal{K}(x, t) = h^2 \left\langle \sum_{op, op'} A_{op}A_{op'} \cos \left(\frac{S_{op} - S_{op'}}{\hbar} \right) \delta \left(t - \frac{\tau_{op} + \tau_{op'}}{2\hbar} \right) \right\rangle . \quad (2.18)$$

Dans l'approximation la plus simple, on néglige les interférences entre termes croisés et on ne garde que les termes ayant les mêmes orbites. C'est ce que l'on appelle l'approximation diagonale, qui est valable pour des temps $t \ll \tau_H$ où les différences d'actions d'orbites différentes sont beaucoup plus grande que \hbar . Lorsque le système possède la symétrie par inversion du temps, on doit donc compter l'orbite pour des temps croissants et l'orbite pour des temps décroissants, on a alors :

$$\mathcal{K}(x, t) = h^2/2 \sum_{op} A_{op}^2 \delta(t - \tau_{op}) . \quad (2.19)$$

Pour des temps tels que $t < \tau_{\min}$, le facteur de forme est donc nul. Lorsque $\tau_{\min} \ll t \ll \tau_H$ on peut montrer que dans le cas d'un système chaotique [24, 25], le facteur de forme est donné par le théorie des matrices aléatoires et il est linéaire en t (voir [26] pour de récents progrès dans cette direction). Dans le cas d'un système intégrable, \mathcal{K} se comporte pour $t > \tau_{\min}$ comme celui d'un spectre entièrement décorrélé [25], il est donc constant en t . Pour des temps supérieurs à τ_H , \mathcal{K} pour des systèmes intégrables ou chaotiques sature à τ_H . Dans le cas des systèmes chaotiques il a été conjecturé pour $t \gg \tau_{\min}$ que le facteur de forme est décrit par la théorie des matrices aléatoires (TMA) [27]. La figure 2 résume les caractéristiques du facteur de forme.

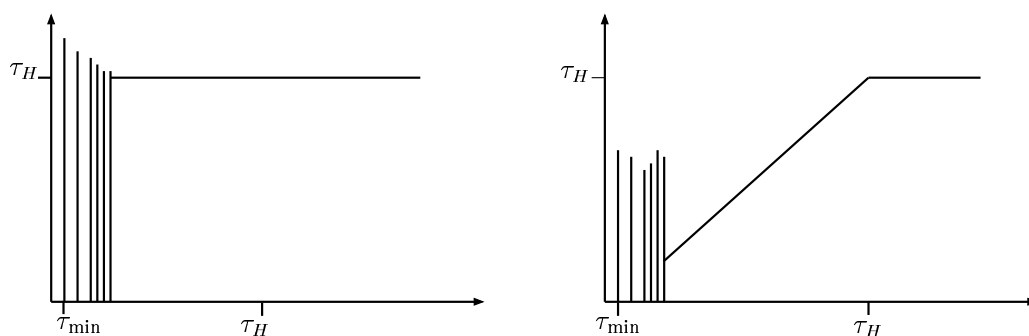


FIG. 2.1 – Schéma typique du facteur de forme pour des systèmes intégrables (à gauche) et pour des systèmes chaotiques (à droite).

On se propose maintenant de décrire en bref la TMA pour mieux comprendre les propriétés statistiques du facteur de forme pour des systèmes chaotiques.

Les matrices aléatoires ont commencé à être étudiées par Wigner [28] à partir de problèmes de physique nucléaire. En effet en supposant que le noyau atomique est un système quantique très complexe, même si on arrive à calculer le spectre pour de faibles énergies, il est pratiquement impossible de calculer exactement les niveaux pour de grandes énergies d'excitation. Seul un traitement statistique est possible. On peut alors supposer que pour la partie haute du spectre, les niveaux se distribuent de manière aléatoire. On attendrait donc une distribution poissonnienne pour la distribution de probabilité $\mathcal{P}(s)$ de l'espacement entre niveaux voisins s . Or à partir de données expérimentales de section efficace de réaction nucléaire à l'énergie de séparation des neutrons, on observe que le spectre possède des répulsions de niveaux, *i.e.* il est peu probable de trouver des niveaux proches en énergie [29] (voir figure 2.2). On a constaté que les systèmes chaotiques possèdent

aussi ce type de comportement [27]. Or ceci est en contradiction avec une statistique Poissonienne. Nous allons voir que la TMA permet d'expliquer ce phénomène.

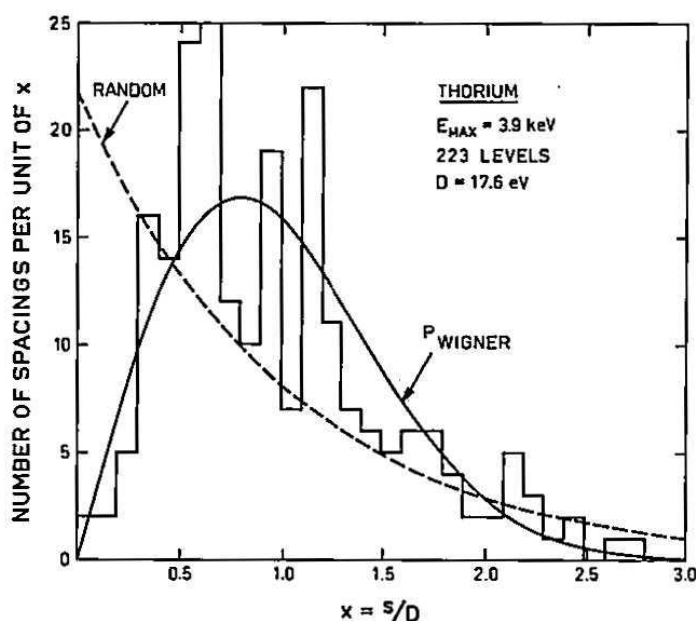


FIG. 2.2 – Cette figure est tirée de [4] et représente le $\mathcal{P}(x)$ du Thorium dans la réaction $n + {}^{232}\text{Th}$ jusqu'à une énergie de neutrons $E_n = 3.9$ keV (223 resonances). L'espacement énergétique moyen est dénoté par D . L'histogramme représente les données expérimentales [31]. La courbe en pointillé indique un $\mathcal{P}(x)$ pour des énergies tirées au hasard. La courbe pleine indique un $\mathcal{P}(x)$ pour des énergies provenant de la théorie des matrices aléatoires.

Si on suppose que tous les éléments de la matrice d'un hamiltonien sont indépendants et que le hamiltonien est invariant sous toutes transformations orthogonales, cela décrit complètement l'ensemble des matrices gaussiennes orthogonales (GOE). D'autres types de symétries imposées au système ont été étudiées [30]. Par exemple lorsque le système ne possède pas d'invariance temporelle (ensemble GUE). Ici nous nous concentrons sur le cas (GOE). L'ensemble H a une dimension $n(n-1)/2$ pour une matrice de taille $n \times n$. H est invariant sous toutes transformations orthogonales W : $H' = W^T H W$. La probabilité $\mathcal{P}(H)dH$ que la matrice H soit dans le volume dH est invariable par transformation orthogonale, $\mathcal{P}(H')dH' = \mathcal{P}(H)dH$. De plus tout les éléments de la matrice H_{ij} sont des variables aléatoires indépendantes avec

$i \leq j \leq n$. Ces deux contraintes suffisent à caractériser le système de manière unique. On obtient ainsi, après changement de variable la distribution de probabilité jointe :

$$\mathcal{P}_n(E_1, \dots, E_n) = C_n \exp \left(-\frac{1}{4v^2} \sum_i E_i^2 \right) \prod_{j>i} |E_i - E_j|, \quad (2.20)$$

où E_i sont les valeurs propres de H , v est la variance des termes non-diagonaux de H et C_n une constante de normalisation. Les fonctions de corrélation à k -points sont données par :

$$\rho_k(E_1, \dots, E_k) = \frac{n!}{(n-k)!} \int dE_{k+1} \dots dE_n \mathcal{P}_n(E_1, \dots, E_n). \quad (2.21)$$

La fonction de corrélation à 1-point donne la densité moyenne de niveaux. Pour n suffisamment grand, on a :

$$\rho_1(E) = \begin{cases} (2\pi v^2)^{-1} \sqrt{4nv^2 - E^2}, & \text{pour } |E| < 2\sqrt{v^2 n} \\ 0, & \text{pour } |E| > 2\sqrt{v^2 n}. \end{cases} \quad (2.22)$$

On obtient alors une densité moyenne de niveaux en forme de demi-cercle. Aucun système physique connu ne possède une telle densité.

$\mathcal{P}(s)$ pour un n quelconque est assez compliqué, néanmoins celui-ci est bien décrit par le cas $n = 2$.

On a alors :

$$\mathcal{P}(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\pi s^2/4}. \quad (2.23)$$

La répulsion des niveaux est bien retrouvée dans l'hypothèse d'un hamiltonien décrit par des matrices aléatoires.

Le facteur de forme a été calculé pour de nombreux types de matrices aléatoires. Le cas GOE donne un facteur de forme linéaire pour des temps courts et constant pour des temps longs.

Deuxième partie

L'énergie du fondamental d'un gaz de Fermi

Chapitre 3

Cas nucléaire, le modèle de la goutte liquide

La masse d'un noyau est l'une des propriétés importantes de la physique nucléaire. Bien que cette caractéristique soit élémentaire, son comportement n'est pas du tout trivial. Or d'après Einstein l'énergie d'un noyau est donnée par la somme des masses propres des constituants du noyau moins l'énergie de liaison. La somme des masses ne donne qu'une partie évidente à l'étude du noyau, ainsi la façon la plus commode pour étudier les propriétés du noyau est de regarder son énergie de liaison. Nous verrons dans la partie trois que l'étude de l'énergie de liaisons est capitale pour comprendre ρ_{MB} .

Le modèle de la goutte liquide (Weizsäcker, [32]) fut un des premiers modèles du noyau atomique à être proposé. Celui-ci est assimilé à un fluide quantique constitué de nucléons qui sont confinés dans un volume fini de l'espace par l'interaction forte. L'équilibre de cette goutte est le résultat de plusieurs contributions :

- un terme attractif de volume a_V dû à l'interaction de chaque nucléon avec ses voisins *via* l'interaction forte.
- une contribution répulsive de surface a_S due au fait que le nombre de voisins étant moins nombreux pour chaque nucléon présent aux bords de la goutte, leur contribution à l'énergie de liaison est plus faible.
- le terme de répulsion coulombienne a_C due aux charges des particules.
- le terme de symétrie a_I traduisant le fait que le proton est stabilisé par la présence d'un neutron. Ceci favorise les noyaux ayant des quantités comparable de neutrons et de protons.
- enfin le terme de pairing a_P correspondant au comportement super fluide du noyau. Nous verrons dans la prochaine partie que l'étude de l'énergie de liaison est capitale pour comprendre le comportement de ρ_{MB} .

On a alors la formule suivante pour l'énergie de liaison du noyau :

$$B_{LD}(N, Z) = a_V A + a_S A^{2/3} + a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} + a_I \frac{(N - Z)^2}{A} - a_P \frac{\Delta(N, Z)}{A^{1/2}}, \quad (3.1)$$

où N est le nombre de neutrons, Z est le nombre de protons et $A = N + Z$ est le nombre de masse. On obtient la valeur des paramètres par la méthode des moindres carrés [33] : $a_V = 15.67$ $a_S = -17.23$ $a_C = 0.714$ $a_I = 23.29$ $a_P = 11.2$ en MeV. $\Delta(N, Z) = -1, 0, +1$ pour, respectivement des noyaux pair-pair, impair-pair, impair-impair.

Le modèle de la goutte liquide fut perfectionné en 1969 par Myers et Swiatecki [34].

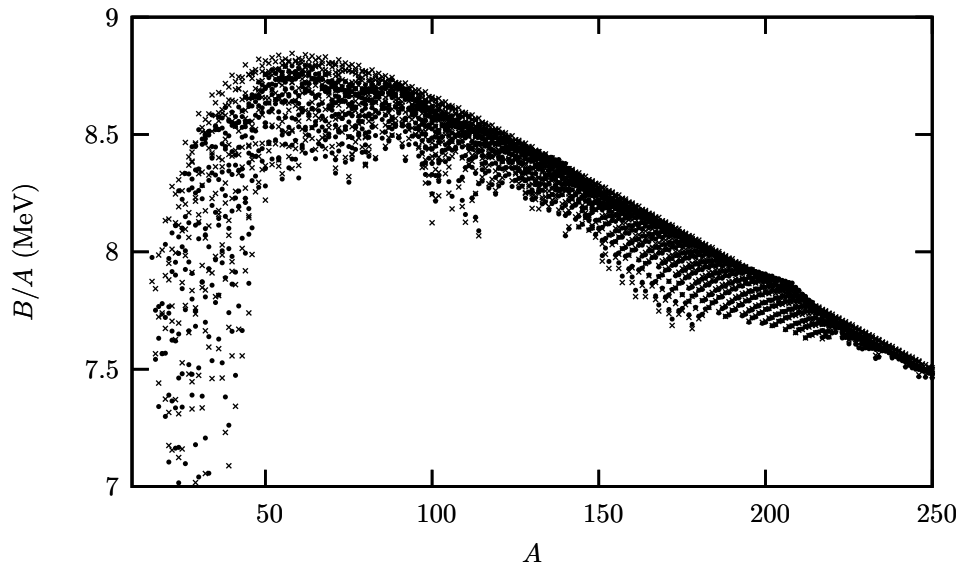


FIG. 3.1 – Energie de liaison des noyaux atomiques divisée par le nombre de masse A en fonction du nombre de masse. Les points correspondent aux données expérimentales [14]. Les croix correspondent au modèle de goutte liquide Eq.(3.1).

Des termes correspondant à l'appariement nucléaire, à la diffusivité de la surface du noyau, *etc.* furent progressivement ajoutés. Ce modèle fut historiquement très important : il permit de reproduire les masses atomiques avec une bonne précision : 90 à 95% de l'énergie de liaison correspond à une goutte liquide, le reste provenant d'effets purement quantiques (voir figure 3.1).

Mais le modèle de la goutte liquide est entièrement macroscopique et phénoménologique et ignore la nature quantique des protons et des neutrons,

ainsi que celle des interactions nucléons–nucléons. En fait les mesures systématiques d'énergies de liaison des noyaux atomiques montrent une déviation par rapport à l'énergie de goutte liquide. La figure 3.2 représente l'énergie de couche des noyaux, *i.e.* la différence

$$\tilde{E}_{SB}(N) = B_{EXP}(Z, N) - B_{LD}(N, Z) \quad (3.2)$$

entre l'énergie de liaison expérimentale et l'énergie de la goutte liquide (3.1). On voit que certains noyaux possédant des nombres particuliers de neutrons sont beaucoup plus liés que ne le prédit le modèle de la goutte liquide. Ces noyaux sont dits magiques. De plus on remarque que la valeur moyenne de l'énergie de couche est nulle. C'est un traitement *ad hoc* qui correspond à la façon dont on paramétrise la goutte liquide. Dans le prochain chapitre nous allons établir la théorie de la moyenne de l'énergie de couche et du comportement de ces oscillations.

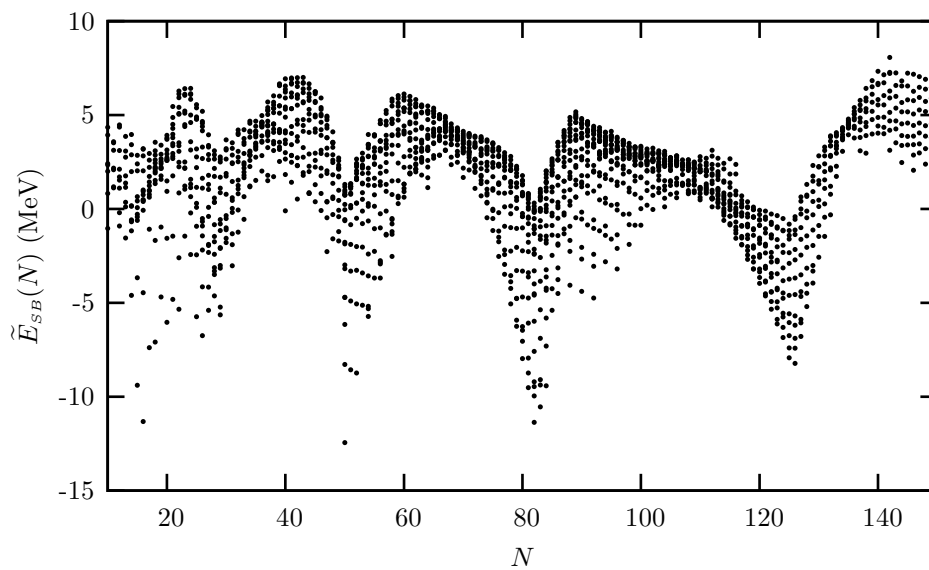


FIG. 3.2 – Energie de couche $\tilde{E}_{SB}(N)$ expérimentale en fonction du nombre de neutrons N tiré de [33]. Elle est définie par la différence entre l'énergie de liaison expérimentale $B_{EXP}(Z, N)$ et l'énergie de la goutte liquide (3.1).

Chapitre 4

Modèle théorique

Une grande partie des difficultés pratiques rencontrées dans les théories de champ moyen est la définition (ou le calcul) du potentiel de champ moyen lui-même. On distingue, très sommairement, deux approches.

Premièrement l'approche des méthodes semiclassiques qui consiste à paramétriser le potentiel nucléaire par une fonction appropriée. Historiquement, cette procédure fut appliquée avec succès par Nilsson [35] qui utilisa un potentiel de type oscillateur harmonique déformé. Des paramétrisations plus récentes reposent sur des fonctions plus réalistes qui décrivent plus fidèlement par exemple les expériences de diffusion. Citons notamment la forme de Woods-Saxon.

Deuxièmement une approche auto-cohérente (ou Hartree-Fock) qui a pour but de déduire le potentiel nucléaire à partir de l'interaction nucléon-nucléon [10]. Cette technique nécessite de résoudre l'équation de Schrödinger par une procédure itérative, le potentiel y figurant dépendant des fonctions d'onde qu'on cherche à déterminer. Celles-ci s'écrivent sous la forme d'un déterminant de Slater. Dans le cas des approches Hartree-Fock, la difficulté n'est pas la fonction mathématique qui décrira le mieux le potentiel nucléaire, mais celle qui s'approchera le plus de l'interaction nucléon-nucléon. En effet l'interaction nucléon-nucléon dans le noyau n'est pas bien connue. Bien qu'étant quantitativement très bonne à décrire les énergies de liaisons, cette approche théorique ne peut se passer de calculs sur ordinateur. Ainsi l'interprétation des résultats est difficile.

Une compréhension théorique globale peut être faite à partir de la première approche grâce aux théories semiclassiques développées en première partie de la thèse. De manière générale, ce type d'approche est plus facile à développer et donne de bons résultats dans le cas de systèmes intégrables.

Néanmoins on soulignera aussi que des travaux sur l'énergie de liaisons à partir de systèmes chaotiques ont été menés pour répondre au problème de limite de précision des modèles numériques actuels [36, 37].

Le cas qui nous intéressera, pour une grande partie de la suite, sera un système de fermions avec dégénérescence de spin dans un potentiel champ moyen, soit de type billard, soit lisse. Nous nous intéresserons aux propriétés de l'énergie du fondamental. Pour ce faire l'approche microcanonique est la plus pertinente : en effet le nombre de particules et l'énergie sont fixés.

Par définition l'énergie du système à température nulle s'écrit comme :

$$E(\mu) = \int_0^\mu \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon . \quad (4.1)$$

Cette quantité n'est pas celle qui nous intéresse en ce sens qu'elle est fonction du potentiel chimique traité comme paramètre libre. Cette équation fait donc partie d'une approche grand canonique du système. Ce que nous voulons, c'est l'énergie du fondamental en fonction du nombre de particules N du système. Nous avons donc une contrainte sur la densité de niveaux cumulée Eq.(1.13) :

$$\mathcal{N}(\mu) = N . \quad (4.2)$$

Le potentiel chimique est donc fonction de N . En inversant cette dernière relation on obtient donc l'énergie du fondamental en fonction du paramètre N :

$$E(N) = E(\mu_N) = \int_0^{\mu_N} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon . \quad (4.3)$$

Cette équation diffère de l'équation (4.1) en ce sens qu'elle prend en compte le fait que le potentiel chimique soit évalué en des points discrets.

Ceci est une remarque très importante qui nous servira pour la compréhension de la valeur moyenne de l'énergie du fondamental [38, 39, 40].

De la même façon on définit les expressions lisses analogues aux équations (4.2) et (4.3) :

$$\bar{\mathcal{N}}(\mu) = N \text{ et } \bar{E}(N) = \bar{E}(\bar{\mu}_N) = \int_0^{\bar{\mu}_N} \epsilon \bar{\rho}(\epsilon) d\epsilon . \quad (4.4)$$

En inversant l'équation de gauche, le potentiel chimique lisse $\bar{\mu}$ est donc aussi fonction de N .

Si nous approximons ρ par $\bar{\rho}$ dans les équations exactes (4.2) et (4.3), on récupère alors aux ordres dominants une énergie qui a une forme proche de celle du modèle de la goutte liquide avec des termes de développement en fonction des paramètres géométriques (termes de volume et de surface). On obtient alors une courbe qui a la même variation en moyenne que B_{LD}/A ,

mais jusqu'au pic du Fer. Car au-delà de ces noyaux, l'énergie de liaison diminue à cause de l'interaction coulombienne qui tend à repousser les protons et donc déstabilise le noyau. Cette interaction n'est pas prise en compte dans notre modèle.

La variation globale est donc plutôt bien reproduite, la théorie de Thomas-Fermi permet d'avoir une modélisation analytique de l'énergie du noyau et des gaz de Fermi en général. Néanmoins l'expression théorique pour une application au noyau, en imposant par exemple la conservation du volume, donne des coefficients assez mauvais des termes géométriques.

Comme nous l'avons expliqué dans le chapitre 1, $\bar{\rho}$ ne permet de décrire qu'en moyenne les quantités thermodynamiques grand canonique. Le spectre du système possède une structure bien plus fine.

La grandeur qui caractérisera alors le mieux le système est l'énergie de couche microcanonique $\tilde{E}(N)$ (voir chapitre 3) :

$$\tilde{E}(N) = E(N) - \bar{E}(N) . \quad (4.5)$$

Ainsi d'après l'équation (2.1) on s'attend à des oscillations de l'énergie en fonction du nombre de particules par le biais du potentiel chimique, néanmoins d'un ordre inférieur à $\bar{E}(N)$. De manière générale on aura, pour certaines valeurs de N , une stabilisation du système reflétée par une valeur petite de $\tilde{E}(N)$, ou une déstabilisation reflétée par une valeur grande de $\tilde{E}(N)$. Expérimentalement on observe très bien ce comportement pour l'énergie de liaison des noyaux (voir figure (3.2)) ou pour des clusters métalliques [13]. Le phénomène d'oscillation de l'énergie de couche étant globalement compris, il nous reste à étudier sa moyenne en fonction du nombre de particules.

Dans l'article intitulé “*Average ground-state energy of finite Fermi systems*” [39] nous abordons la théorie générale de la partie moyenne de $\tilde{E}(N)$ pour des gaz de Fermi dans des potentiels fixes. En effet, on sait que pour un système grand canonique on a une valeur moyenne de $\tilde{E}(\mu)$ qui est nulle. Or considérer un système microcanonique modifie les valeurs moyennes des quantités thermodynamiques. Nous donnons des estimations de ces moyennes pour différents systèmes : intégrables, chaotiques ou déformés. Nous comparons enfin nos résultats avec des modèles numériques plus réalistes appliqués à la physique nucléaire.

Average ground-state energy of finite Fermi systemsM. Centelles,¹ P. Leboeuf,² A. G. Monstra,³ J. Roccia,² P. Schuck,⁴ and X. Viñas¹¹*Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Facultat de Física, Universitat de Barcelona, Diagonal 647, E-08028 Barcelona, Spain*²*Laboratoire de Physique Théorique et Modèles Statistiques, CNRS, Université de Paris-Sud, UMR 8626, F-91405 Orsay Cedex, France*³*TU Dresden Institut für Theoretische Physik, D-01062 Dresden, Germany*⁴*Institut de Physique Nucléaire, IN2P3-CNRS, Université de Paris-Sud, F-91406 Orsay Cedex, France*

(Received 24 July 2006; published 29 September 2006)

Semiclassical theories such as the Thomas-Fermi and Wigner-Kirkwood methods give a good description of the smooth average part of the total energy of a Fermi gas in some external potential when the chemical potential is varied. However, in systems with a fixed number of particles N , these methods overbind the actual average of the quantum energy as N is varied. We describe a theory that accounts for this effect. Numerical illustrations are discussed for fermions trapped in a harmonic oscillator potential and in a hard-wall cavity, and for self-consistent calculations of atomic nuclei. In the latter case, the influence of deformations on the average behavior of the energy is also considered.

DOI: [10.1103/PhysRevC.74.034332](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.74.034332)

PACS number(s): 21.10.Dr, 05.30.Fk, 05.45.Mt

I. INTRODUCTION

A basic problem in the physics of finite fermion systems such as, for example, atoms, nuclei, helium clusters, metal clusters, or semiconductor quantum dots, is the determination of the ground-state energy E . A standard decomposition, deeply rooted in the connection of classical and quantum physics, is to write E as the sum of an average energy \bar{E} and a fluctuating part \tilde{E} [1–3]:

$$E(N) = \bar{E}(N) + \tilde{E}(N). \quad (1)$$

The largest contribution, \bar{E} , is a smooth function of the number N of fermions. The shell correction \tilde{E} has a pure quantal origin and displays, instead, an oscillatory behavior as a function of N .

Equation (1) underlies the usefulness of the so-called mass formulas, such as the liquid drop model for nuclei or for metal clusters, of which the oldest example is the well-known Bethe-Von Weizsäcker mass formula for the binding energy of nuclei. The decomposition (1) is also at the basis of semiclassical and statistical techniques that are used to investigate how the properties of global character of fermion systems vary with the particle number N . Such is the case, for instance, of the celebrated Thomas-Fermi and Wigner-Kirkwood theories [1,2]. These methods often provide deep physical insights that might otherwise be obscured behind a full quantum calculation.

It is recognized, however, that the semiclassical calculations of $\bar{E}(N)$ for fermion systems in either external potentials or self-consistent mean fields show systematic deviations with respect to the actual average of the exact quantum results [1,2,4–8]. For example, in spherically symmetric calculations one finds that, as a function of the number N of particles, the difference $E(N) - \bar{E}(N)$ between the (fluctuating) exact value $E(N)$ and the (smooth) semiclassical average $\bar{E}(N)$ does not oscillate around zero. In general, for fermions in a fixed external potential, semiclassical calculations overbind

the true average of the quantum energy. One of our purposes in the present work is to explain the origin of this effect and to derive an explicit formula that allows one to compute the correct average behavior of $E(N)$ in fermion systems. Related studies are the works of Refs. [9,10], where a particle-number-conserving shell correction method has been pursued.

Additional contributions to the average part of the ground-state energy come in fact from a careful analysis of the oscillatory term $\tilde{E}(N)$. Because this fluctuating function is evaluated at discrete values of the chemical potential (which correspond to integer values of the particle number), its average value is generically nonzero and therefore contributes to the average part of $E(N)$. This phenomenon is related to the different physical descriptions of quantum mechanical systems obtained from different thermodynamic ensembles, the grand canonical and the canonical in the present context. This subtle topic has played, in recent years, a crucial role in understanding the physics of, for example, persistent currents in mesoscopic metallic rings [11] or in trapped Bose-Einstein condensates [12].

Our results are illustrated with two schematic models. Namely, we study the average of $E(N)$ for fermions in a harmonic oscillator (HO) potential, via the semiclassical Wigner-Kirkwood (WK) theory [13], and for fermions in a spherical cavity with sharp boundaries, via the Weyl expansion [14]. In the former case, analytical expressions are available. Finally, and in contrast to the previous examples where the confining potential is fixed, we consider the influence of deformations and self-consistency on the average behavior of $E(N)$, as well as other related topics. We find that for self-consistent potentials with deformation degrees of freedom the behavior of the average energy is qualitatively different.

II. SMOOTH BEHAVIOR: GRAND CANONICAL VERSUS CANONICAL ENSEMBLES

The usual computation of the different terms in Eq. (1) is as follows. The single-particle level density $g(\varepsilon) = \text{Tr}[\delta(\varepsilon - \hat{H})]$

of a quantum fermion system can be expressed as [1,2,13]

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \iint \frac{\partial f_\varepsilon(\vec{r}, \vec{p})}{\partial \varepsilon} d\vec{p} d\vec{r} \quad (2)$$

in terms of the phase-space Wigner function $f_\varepsilon(\vec{r}, \vec{p})$. We have included a factor 2 to account for spin degeneracy. Then, for a set of fermions in a potential well filled up to an energy μ , the number of states (accumulated level density) and the ground-state energy are obtained from $g(\varepsilon)$ through

$$\mathcal{N}(\mu) = \int_0^\mu g(\varepsilon) d\varepsilon, \quad E(\mu) = \int_0^\mu \varepsilon g(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3)$$

Inserting the Wigner-Kirkwood expansion of the Wigner function $f_\varepsilon(\vec{r}, \vec{p})$ in powers of \hbar in Eq. (2) produces a smooth function $\bar{g}(\varepsilon)$, where the leading order gives rise to the Thomas-Fermi term. This procedure is well documented in the literature [1,2,15–18]. Inserting the latter series for $g(\varepsilon) \approx \bar{g}(\varepsilon)$ into Eqs. (3) yields the semiclassical \hbar expansions for $\bar{\mathcal{N}}(\mu)$ and $\bar{E}(\mu)$. Alternatively, for a Fermi gas contained in a hard-wall cavity, one inserts in Eqs. (3) the corresponding Weyl expansion [14] of the average single-particle level density $\bar{g}(\varepsilon)$. In both cases, Eqs. (3) produce a series in decreasing powers of μ whose coefficients depend on the shape of the potential.

These expressions provide in general accurate descriptions of the average behavior of $g(\varepsilon)$, $\mathcal{N}(\mu)$, and $E(\mu)$. For instance, for an isotropic three-dimensional HO potential of frequency ω one obtains the well-known WK expressions [1,2,15–18]

$$\bar{g}(\varepsilon) = \left[\left(\frac{\varepsilon}{\hbar\omega} \right)^2 - \frac{1}{4} \right] \frac{1}{\hbar\omega} + \frac{17}{960} \hbar\omega \delta'(\varepsilon), \quad (4)$$

$$\bar{\mathcal{N}}(\mu) = \frac{1}{3} \left(\frac{\mu}{\hbar\omega} \right)^3 - \frac{1}{4} \frac{\mu}{\hbar\omega}, \quad (5)$$

$$\bar{E}(\mu) = \left[\frac{1}{4} \left(\frac{\mu}{\hbar\omega} \right)^4 - \frac{1}{8} \left(\frac{\mu}{\hbar\omega} \right)^2 - \frac{17}{960} \right] \hbar\omega. \quad (6)$$

The last term in Eq. (4) contains the derivative of the delta function $\delta(\varepsilon)$. This term and the last term in Eq. (6) stem from the corrections of order \hbar^4 to \bar{g} and \bar{E} , respectively. In the HO potential the \hbar^4 contribution to $\bar{\mathcal{N}}$ vanishes.

Figure 1 displays the comparison between the exact quantum mechanical quantities and the smooth approximations (5) and (6). The upper panel shows the accumulated level density $\mathcal{N}(\mu)$ for a set of fermions in a spherical HO potential, as a function of $\mu/\hbar\omega$. The quantum result exhibits discontinuities at each major shell ($N = 2, 8, 20, 40, 70, 112$ in the present case) and is represented by a staircase function that fluctuates around the smooth WK curve provided by Eq. (5). The oscillatory part of $\mathcal{N}(\mu)$ (dashed curve) contains the fluctuations resulting from shell effects. They are seen to oscillate around zero, with a vanishing net average, as μ is varied. The lower panel of Fig. 1 displays the ground-state energy $E(\mu)/\hbar\omega$ for the same potential [19]. Again, the smooth WK curve excellently averages the quantum result and the shell energy fluctuates around zero.

The fact that the average behavior of the remaining shell corrections is zero for $E(\mu)$ and $\mathcal{N}(\mu)$ can be explicitly checked. The general semiclassical theory expresses the fluctuating parts $\tilde{E}(\mu) = E(\mu) - \bar{E}(\mu)$ and $\tilde{\mathcal{N}}(\mu) = \mathcal{N}(\mu) - \bar{\mathcal{N}}(\mu)$ as sums over the classical periodic orbits of the system at

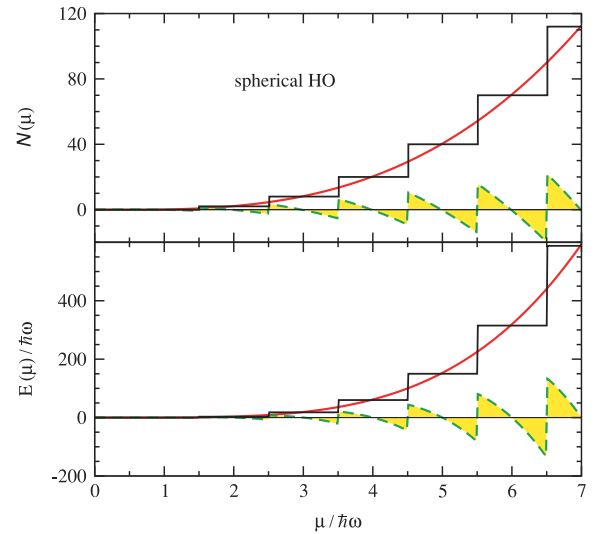


FIG. 1. (Color online) Accumulated level density (upper panel) and total energy (lower panel) with spin-degeneracy 2 for a spherical HO potential as a function of chemical potential μ . Staircase, solid, and dashed lines correspond to the quantum, semiclassical WK, and shell correction (quantum minus semiclassical) values, respectively.

energy μ [1,20–22]. Each term in $\tilde{E}(\mu)$ and $\tilde{\mathcal{N}}(\mu)$ is an oscillatory function of the chemical potential (through the action of the corresponding orbit), whose average over a chemical potential window is zero. In the particular case of the HO potential the semiclassical approximation turns out to be exact (see, e.g., Refs. [1,23]) and takes the form

$$\mathcal{N}(\mu) = \bar{\mathcal{N}}(\mu) + 2 \sum_{M=1}^{\infty} \frac{(-1)^M}{M_r^3} [\mu_r \cos \mu_r + (\mu_r^2 - 2 - \frac{1}{4} M_r^2) \sin \mu_r], \quad (7)$$

$$E(\mu) = \bar{E}(\mu) + 2 \sum_{M=1}^{\infty} \frac{(-1)^M}{M_r^4} [(3\mu_r^2 - 6 - \frac{1}{4} M_r^2) \cos \mu_r + (\mu_r^2 - 6 - \frac{1}{4} M_r^2) \mu_r \sin \mu_r] \hbar\omega, \quad (8)$$

where $M_r \equiv 2\pi M$, $\mu_r \equiv M_r \mu / \hbar\omega$, and $\bar{\mathcal{N}}(\mu)$ and $\bar{E}(\mu)$ are given by Eqs. (5) and (6), respectively. These expressions illustrate explicitly that the average of the fluctuating parts $\tilde{E}(\mu)$ and $\tilde{\mathcal{N}}(\mu)$ over a chemical potential window is zero; that is, $\langle \tilde{E}(\mu) \rangle_\mu = \langle \tilde{\mathcal{N}}(\mu) \rangle_\mu = 0$.

In real physical Fermi gases with a well-defined number of particles the various quantities, such as masses or many-body level densities, are not studied as a function of the chemical potential μ but rather as a function of the particle number N . For instance, the ground-state energy $E(N)$ of the system consists of the sum of the single-particle energies of the N lowest single-particle states (taking into account spin-degeneracy). Thus Eqs. (7) and (8) are related to the grand canonical ensemble. The qualitative behavior of the function $E(N)$ as a function of N is in general quite different from the behavior of $E(\mu)$.

Based on, for example, the Wigner-Kirkwood method, the usual way to calculate the function $E(N)$ is as follows. Having determined, in that approximation, the energy $\bar{E}(\mu)$ and the

accumulated level density $\tilde{\mathcal{N}}(\mu)$, one first fixes the chemical potential (or Fermi energy) in terms of the particle number N by inverting the function

$$\tilde{\mathcal{N}}(\bar{\mu}) = N \implies \bar{\mu}_N = \bar{\mu}(N). \quad (9)$$

To be consistent in the notation, we use $\bar{\mu}_N$ to denote the value of the chemical potential for a given N determined from the WK (or Weyl) approximation, to stress that, in this approximation, μ is computed by inverting the smooth part $\tilde{\mathcal{N}}$ and not the exact counting function \mathcal{N} . Finally, one obtains the smooth Wigner-Kirkwood or Weyl term $\bar{E}(N)$ by replacing μ by $\bar{\mu}_N$ in $\bar{E}(\mu)$,

$$\bar{E}(N) = \bar{E}(\bar{\mu}_N) = \int_0^{\bar{\mu}_N} \varepsilon \bar{g}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (10)$$

For example, applying this procedure to the isotropic HO potential, from the leading terms of Eqs. (5) and (6) one straightforwardly obtains

$$\bar{E}(N) = \frac{1}{4}(3N)^{4/3}\hbar\omega, \quad (11)$$

which is the leading-order Thomas-Fermi result. This shows that in a HO the leading dependence of the average energy per particle, in units of $\hbar\omega$, is $\propto N^{1/3}$.

The full Wigner-Kirkwood function $\bar{E}(N)/N$ computed for the HO potential including contributions up to the fourth-order in \hbar is plotted in Fig. 2 (dashed line) as a function of the particle number N , in units of $\hbar\omega$. It is compared to the exact quantum result (solid line). To better visualize the quantum oscillations with changing N , we have subtracted the dominant $N^{1/3}$ dependence [recall Eq. (11)] from *both* the quantum and the WK curves. The upper panel of Fig. 2 displays the results for the isotropic HO potential. The lower panel is for a strongly deformed potential and it will be discussed

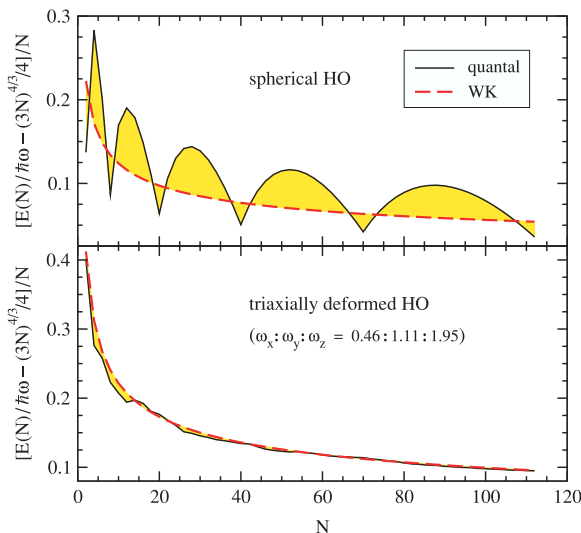


FIG. 2. (Color online) (Upper panel) Quantum and WK values of the energy per particle for a spherical HO potential as a function of the number of particles, in units of $\hbar\omega$. The leading N dependence given by Eq. (11) is subtracted from *both* curves. (Lower panel) The same as in the upper panel but for a strongly triaxially deformed HO potential. Notice that the WK curves are different in the spherical and deformed cases.

later on. Focusing on the isotropic HO, one sees that, as expected, the general trend of the smooth WK result turns out to be quite correct in comparison with the global particle number dependence of the quantum energies. There is, however, a systematic deviation in the sense that the WK curve does not pass as a function of N through the average of the quantum values. This is clearly seen from the large asymmetry of the shaded regions above and below the WK curve in the upper panel of Fig. 2. One notices that the WK result overbinds with respect to the true average of the quantum values when N is varied in the spherical symmetry. The same situation prevails in other problems of atomic and nuclear physics as well as in self-consistent mean-field calculations [1,2,4–8].

III. CONTRIBUTION OF THE OSCILLATORY CORRECTIONS

The previous results show that the function $\bar{E}(N)$ does not describe appropriately the average behavior of $E(N)$. We now discuss the origin of the discrepancy and the way to correct it.

In systems with a well-defined number of particles the chemical potential μ takes discrete values. These values do not occur at random. For instance, for an even number of particles and nondegenerate single-particle states, a standard rule is to locate the chemical potential half-way between the last occupied and the first unoccupied single-particle states. Fixing a particular rule to determine the chemical potential at a given number of particles introduces a bias in the sampling of the values of μ (with respect to a uniform, random distribution of μ). Because of this bias, when the oscillatory part of the energy $\bar{E}(\mu)$ is evaluated over the set of discrete points it produces, generically, a function whose average is different from zero. To compute that average we proceed as follows.

The decomposition of the single-particle level density into a smooth part and a fluctuating part,

$$g(\varepsilon) = \bar{g}(\varepsilon) + \tilde{g}(\varepsilon),$$

where $\bar{g}(\varepsilon)$ is the WK (or Weyl) smooth part and $\tilde{g}(\varepsilon)$ is given by the sum over periodic orbits already mentioned [1], induces a corresponding decomposition of the integrated density [cf Eqs. (3)]:

$$\mathcal{N}(\mu) = \tilde{\mathcal{N}}(\mu) + \tilde{\mathcal{N}}(\mu). \quad (12)$$

For a given number of particles N , the chemical potential is defined by inversion of the exact accumulated level density

$$\mathcal{N}(\mu) = N \implies \mu_N = \mu(N). \quad (13)$$

As the particle number N increases, it is natural to decompose the chemical potential into smooth and fluctuating parts:

$$\mu_N = \bar{\mu}_N + \tilde{\mu}_N.$$

The average part $\bar{\mu}_N$ satisfies Eq. (9). Assuming that $\tilde{\mu}_N \ll \bar{\mu}_N$, a Taylor expansion of the smooth part in powers of $\tilde{\mu}_N$ around $\mu = \bar{\mu}_N$ in Eq. (12) yields, to lowest order,

$$\tilde{\mu}_N = -\frac{1}{\bar{g}} \tilde{\mathcal{N}}(\mu_N), \quad (14)$$

where we denote

$$\bar{g} = \bar{g}(\bar{\mu}_N). \quad (15)$$

(Note that no Taylor expansion is allowed for the fluctuating term $\tilde{\mathcal{N}}$, because it is not a regular function.) Similarly, the energy may be decomposed as

$$E(\mu) = \bar{E}(\mu) + \tilde{E}(\mu). \quad (16)$$

In a system with a well-defined number of particles, the smooth part $\bar{E}(N)$ of the exact function $E(N) = E(\mu_N)$ was defined in (10): $\bar{E}(N) = \bar{E}(\bar{\mu}_N) = \int_0^{\bar{\mu}_N} \varepsilon \bar{g}(\varepsilon) d\varepsilon$. The fluctuating part is thus defined as

$$\tilde{E}(N) = E(N) - \bar{E}(N). \quad (17)$$

To compute $\tilde{E}(N)$, and in particular its average over some particle-number window ΔN around N , it is convenient to express the energy in terms of the grand potential $\Omega = -\int^\mu \mathcal{N}(\varepsilon) d\varepsilon$ using the thermodynamic relation

$$E(\mu) = \Omega(\mu) + \mu \mathcal{N}(\mu).$$

Recalling the definition of μ_N and $\bar{\mu}_N$ [Eqs. (9) and (13)], we may write Eq. (17) as

$$\tilde{E}(N) = \Omega(\mu_N) - \bar{\Omega}(\bar{\mu}_N) + \tilde{\mu}_N N,$$

where $\bar{\Omega}(\bar{\mu}_N) = -\int_0^{\bar{\mu}_N} \bar{\mathcal{N}}(\varepsilon) d\varepsilon$. Decomposing $\Omega(\mu_N)$ into its average and fluctuating parts, expanding $\bar{\Omega}(\bar{\mu}_N)$ around $\bar{\mu}_N$ to second order in $\tilde{\mu}_N$, and using the thermodynamic relations

$$\frac{\partial \bar{\Omega}(\bar{\mu}_N)}{\partial \bar{\mu}_N} = -\bar{\mathcal{N}}(\bar{\mu}_N) \quad \text{and} \quad \frac{\partial^2 \bar{\Omega}(\bar{\mu}_N)}{\partial \bar{\mu}_N^2} = -\bar{g},$$

we get

$$\tilde{E}(N) = \tilde{\Omega}(\mu_N) - \bar{g} \tilde{\mu}_N^2 / 2.$$

By using Eq. (14), this takes the form

$$\tilde{E}(N) = \tilde{\Omega}(\mu_N) - \frac{1}{2\bar{g}} \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu_N) + \mathcal{O}(\tilde{\mu}_N^3). \quad (18)$$

Equation (18) connects the fluctuations of the grand potential (grand canonical ensemble) to those of the energy at a fixed number of particles (canonical ensemble). This connection, to lowest order, has been exploited in recent years to analyze nuclear-mass fluctuations [24,25].

One may be tempted to think that the average of $\tilde{E}(N)$ over some particle-number window ΔN around N , denoted $\langle \tilde{E}(N) \rangle_N$, is proportional, from Eq. (18), to the variance $\langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu_N) \rangle_N$ of $\tilde{\mathcal{N}}(\mu_N)$ and that the average of $E(N)$,

$$\langle E(N) \rangle_N = \bar{E}(N) + \langle \tilde{E}(N) \rangle_N, \quad (19)$$

is thus lowered with respect to $\bar{E}(N)$ [owing to the minus sign in front of $\tilde{\mathcal{N}}^2(\mu_N)$ in Eq. (18)]. However this is wrong because, for the same reasons as for $\bar{E}(N)$, the average $\langle \tilde{\Omega}(\mu_N) \rangle_N \neq 0$. A detailed calculation (cf. the Appendix) shows that

$$\langle \tilde{\Omega}(\mu_N) \rangle_N = \frac{1}{\bar{g}} \langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu_N) \rangle_N + \frac{1}{8\bar{g}} \langle s_N^2 \rangle_N - \frac{1}{6\bar{g}}, \quad (20)$$

where $\langle s_N^2 \rangle_N$ is the variance of the spacing $s_N = \varepsilon_{N+1} - \varepsilon_N$ between two consecutive single-particle levels around μ_N . Taking the average with respect to the discrete points μ_N

in Eq. (18), using Eq. (20) for the average of $\tilde{\Omega}(\mu_N)$, and expressing, for convenience, the average $\langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu_N) \rangle_N$ over the discrete points μ_N in terms of the average $\langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu$ over the continuous variable μ around μ_N (cf. the Appendix),

$$\langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu_N) \rangle_N = \langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu + \frac{1}{6} - \frac{1}{4} \bar{g}^2 \langle s_N^2 \rangle_N, \quad (21)$$

we get

$$\langle \tilde{E}(N) \rangle_N = \frac{1}{2\bar{g}} \langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu - \frac{1}{12\bar{g}} + \mathcal{O}(\tilde{\mu}_N^3). \quad (22)$$

The final expression for the average value of the energy in a system conserving the number of particles is, according to Eqs. (19) and (22),

$$\langle E(N) \rangle_N = \bar{E}(N) + \frac{1}{2\bar{g}} \langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu - \frac{1}{12\bar{g}} + \mathcal{O}(\tilde{\mu}_N^3). \quad (23)$$

It follows from Eq. (23) that, with respect to the WK or Weyl smooth terms, the true average of the energy as a function of N is *increased* by a term proportional to the variance of the accumulated level density. Equation (23) contains all the relevant information on the average and allows us to understand the numerical results just presented. Before making a quantitative comparison, we first discuss the general aspects involved in that equation.

Equation (20) is demonstrated in the Appendix for a system without degeneracies (intrinsic and/or resulting from spin). However, it is easy to see that it is also valid in the presence of degeneracies. This is because the thermodynamic quantities we are considering are continuous variables of a given set of external parameters $\vec{\lambda}$. Assume that for some $\vec{\lambda} = \vec{\lambda}_0$ degeneracies occur and that for slightly different values $\vec{\lambda} \neq \vec{\lambda}_0$ all the degeneracies are lifted (for instance, some of the components of $\vec{\lambda}$ may be associated with a shape deformation, with $\vec{\lambda} = \vec{\lambda}_0$ the spherical case, and another component may be a magnetic field that lifts the spin degeneracy, with $\vec{\lambda} = \vec{\lambda}_0 = 0$ no magnetic field). Then for $\vec{\lambda} \neq \vec{\lambda}_0$ Eq. (20) is valid. One can therefore consider the case with degeneracies as the limit $\vec{\lambda} \rightarrow \vec{\lambda}_0$ and, by continuity, Eq. (20) remains valid.

The variance $\langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu$ in Eq. (23) depends on the system under consideration. However, its general properties can easily be determined. In systems where the typical size of the fluctuations is important, then the shift of the true average $\langle E(N) \rangle_N$ with respect to $\bar{E}(N)$ will also be important. However, in systems with small fluctuations, $\langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu / 2\bar{g}$ will be small, and the term $\bar{E}(N)$ will give a good approximation to not only $\langle E(N) \rangle_N$ but also to $E(N)$ as well (since fluctuations are small). In general, the more regular and/or symmetric a system is, the greater the fluctuations are, and the larger the correction $\langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu / 2\bar{g}$ will be. As the regularities or symmetries are broken, the typical size of the fluctuations diminishes, and $E(N)$ will be well approximated by $\bar{E}(N)$. This point is illustrated in Fig. 2, where the upper panel shows $E(N)/N$ for the isotropic HO, where large fluctuations are observed and clear deviations of the average with respect to $\bar{E}(N)$ are found. In contrast, the lower panel shows a strongly deformed HO, with frequencies $\omega_x/\omega = 0.460$, $\omega_y/\omega = 1.111$, and $\omega_z/\omega = 1.954$ ($\omega_x \omega_y \omega_z = \omega^3$), where small fluctuations are observed,

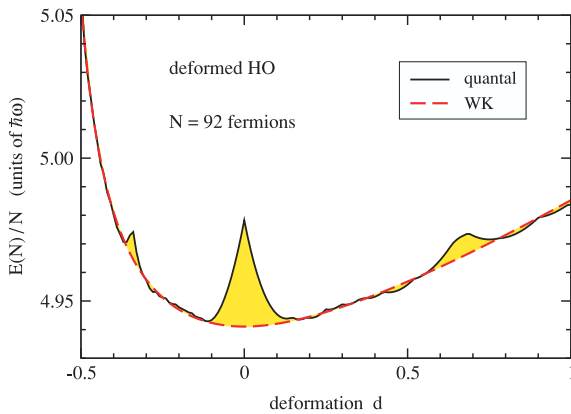


FIG. 3. (Color online) Quantum and WK values of the energy per particle in a triaxially deformed HO potential. Spin degeneracy is included.

and as a consequence good agreement between $E(N)/N$ and $\bar{E}(N)/N$ is found. Another manifestation of the same phenomenon is provided in Fig. 3, where $E(N)/N$ is shown for $N = 92$ fermions (with spin degeneracy) in a triaxially deformed HO potential as a function of the deformation parameter d , where $\omega_x/\omega = \delta^{-1/2}/\sigma^{1/3}$, $\omega_y/\omega = \delta^{1/2}/\sigma^{1/3}$, and $\omega_z/\omega = \sigma^{2/3}$, with $\sigma = 1 + d\sqrt{3}$ and $\delta = 1 + |d|\sqrt{2}$. We see that for most deformations (midshell configurations) the quantum and the smooth WK values practically agree, up to small fluctuations. Large deviations are observed, instead, when sphericity is approached, and for other special deformations, for example, for $d \sim 0.65$, where the frequency ratio $\omega_x : \omega_y : \omega_z$ is close to 1 : 2 : 3 (When the three frequencies ω_x , ω_y , and ω_z are integer ratios, the energy levels of the HO are degenerate and the classical trajectories of the Hamiltonian become closed periodic orbits [1].)

We have made a quantitative check of Eqs. (22) and (23) for the case of a Fermi gas in a spherical cavity. The upper panel of Fig. 4 represents the fluctuating part $\tilde{E}(N)$ as a function of N , defined in Eq. (17). A clear structure organized in shells (rapid oscillations) and supershells (long-

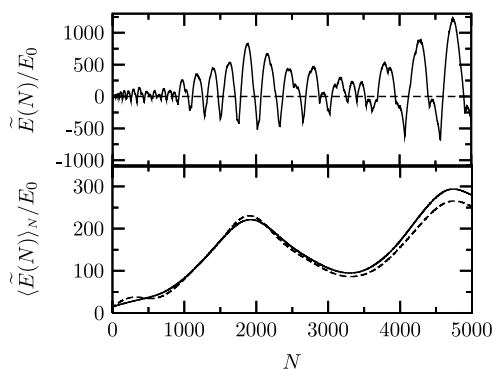


FIG. 4. (Upper panel) Normalized fluctuating part $\tilde{E}(N) = E(N) - \bar{E}(N)$ as a function of N for a spherical cavity. $E_0 = \hbar^2/2mr_0^2$, where r_0 is the radius of the sphere and m is the mass of fermions. (Lower panel) Average $\langle \tilde{E}(N) \rangle_N$ of the fluctuating function in the upper panel (full line) compared to the theoretical prediction, Eq. (22) (dashed line).

range modulation of the rapid oscillations) is observed. The lower panel shows a comparison between the average $\langle \tilde{E}(N) \rangle_N$ calculated numerically from the upper panel of that figure and the result obtained from Eq. (22) as a function of N . The average shows a nontrivial dependence with the particle number (which reflects, to a large extent, the supershell structure), which is very well reproduced by theory.

In the case of the spherical HO, it is possible to easily obtain an analytical expression for $\langle E(N) \rangle_N$. The function $\tilde{N}(\mu)$ is given by the second term in the right-hand side of Eq. (7). By squaring it, the main contribution to $\tilde{N}^2(\mu)$ comes from terms where both indices of the double sum are equal. Hence to leading order in μ , we get

$$\tilde{N}^2(\mu) = \left(\frac{\mu}{\hbar\omega}\right)^4 \sum_{M=1}^{\infty} \left(\frac{\sin(2\pi M\mu/\hbar\omega)}{\pi M}\right)^2. \quad (24)$$

$\langle \tilde{N}^2(\mu) \rangle_\mu$ is calculated by averaging over the rapidly fluctuating factors, given by the sine terms. This yields

$$\langle \tilde{N}^2(\mu) \rangle_\mu = \frac{(\mu/\hbar\omega)^4}{2\pi^2} \sum_{M=1}^{\infty} \frac{1}{M^2} = \frac{1}{12} \left(\frac{\mu}{\hbar\omega}\right)^4. \quad (25)$$

Since $\langle \tilde{N}^2(\mu) \rangle_\mu$ is a smooth function, we replace μ by $\bar{\mu}$. Thus we can use the WK expression Eq. (5) to compute the dependence of the variance with the number of particles. Using, moreover, Eq. (4) we finally get, to leading order in N ,

$$\langle \tilde{E}(N) \rangle_N = \frac{\langle \tilde{N}^2(\mu) \rangle_\mu}{2\bar{g}} = \frac{1}{24}(3N)^{2/3}\hbar\omega. \quad (26)$$

A comparison with the numerical average of $\tilde{E}(N)$, obtained from an isotropic 3D HO, is presented in Fig. 5. The result shows an excellent agreement; compared to the spherical cavity, a much simpler N dependence is observed, owing to the absence of supershells.

Based on general properties of the single-particle spectrum, it is possible to estimate the typical size of the variance $\langle \tilde{N}^2(\mu) \rangle_\mu$ and of its N dependence for a large class of systems and therefore to estimate $\langle E(N) \rangle_N$. The relevant classification relies on the type of classical dynamics associated with the

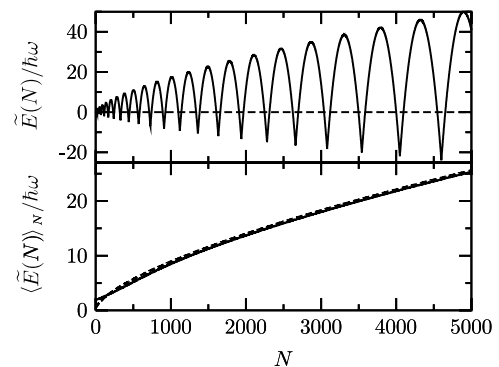


FIG. 5. (Upper panel) Fluctuating part $\tilde{E}(N) = E(N) - \bar{E}(N)$ as a function of N for a 3D isotropic HO. (Lower panel) Average $\langle \tilde{E}(N) \rangle_N$ of the fluctuating function in the upper panel (full line) compared to the theoretical prediction, Eq. (26) (dashed line).

confining potential. The two extreme cases that can be treated explicitly are fully regular and fully chaotic dynamics (with the case of mixed dynamics being more subtle). Based on this classification, explicit results for the typical size of $\langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu$ were obtained in Ref. [26].

IV. DEFORMED AND SELF-BOUND SYSTEMS

Up to now we have considered fermion systems confined by an external potential. This may be applicable to, for example, quantum dot systems or magnetically trapped atomic gases where the self-consistent mean-field part plays a minor role with respect to the external confining potential. However, many relevant systems are self-bound and then the mean-field potential is essentially given by the solution of the self-consistent Hartree-Fock equations, which are obtained by minimizing the energy of the system. The mean field in these situations may turn out to be spherical, but in many cases rotational invariance will be broken and the mean field becomes deformed. We will see that in these cases the results can show interesting differences with regard to the scenario found in the upper panel of Fig. 2 or in Fig. 5 for the harmonic oscillator, and in Fig. 4 for the hard-wall cavity, where the potential was kept spherical. We want to investigate such cases now.

First, to illustrate the situation, we again consider the HO potential. In contrast to the previous section, for each particle number we now minimize the ground-state energy of the quantum solution with respect to deformation, that is, with respect to free variation of ω_x , ω_y , and ω_z , under the constraint of volume conservation ($\omega_x \omega_y \omega_z = \omega^3$). This must be done in carefully checking simultaneously the optimal choice of the occupancies n_x , n_y , n_z . The semiclassical energies $\bar{E}(N)$ always have their absolute minimum at sphericity as given by Eq. (6). As a particular example of a self-bound system, we consider the case of atomic nuclei. We mimic the saturation properties of nuclear forces by including the standard particle-number dependence of the HO frequency $\hbar\omega = 41A^{-1/3}$ MeV [2] with $A = 2N$ (i.e., A here represents the mass number of a hypothetical uncharged nucleus with N protons and N neutrons).

In Fig. 6 we show the difference δE between the fully minimized quantum energies and the corresponding isotropic semiclassical expression $\bar{E}(N)$ obtained from Eqs. (5) and (6). For comparison, we include in the same figure the fluctuating part $\tilde{E}(N)$ for the spherical HO (the same curve as in the upper part of Fig. 5). We observe that, with respect to the purely spherical case, the situation changes considerably. Now, in contrast to the spherical case, practically all values of δE from the minimized quantum solutions are negative, meaning that the minimized quantum energies stay *below* the semiclassical curve $\bar{E}(N)$. The minimized quantum energies coincide with the spherical ones only in a small neighborhood around the shell closures, whereas away from the latter the system is axially deformed or even, around the middle of the shells, a slight triaxiality can appear. (In the case of axial symmetry, typical deformations show an axis ratio of 2:3.)

It seems natural that the deformed quantum energies are more bound than the approximate energies obtained from the

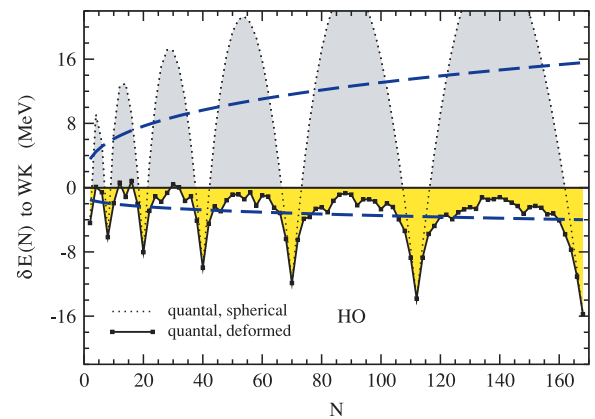


FIG. 6. (Color online) Difference between the minimized ground-state energy with respect to deformations and the spherical WK energy $\bar{E}(N)$ for fermions in a HO potential (squares joined by full line). For comparison, the dotted curve shows the energy difference for an isotropic HO (same curve as in the upper part of Fig. 5). The average of both curves is shown by a long-dashed line. The scaling $\hbar\omega = 41(2N)^{-1/3}$ MeV has been used in the calculations.

semiclassical theory, in spite of the fact that to our knowledge no upper bound theorem like the Rayleigh-Ritz principle exists for the semiclassical approach. We wish to point out that in Fig. 6 for most values of N the system is actually rather well deformed and that, with the exception of a couple of particle numbers around closed shells, the energy differences are in most cases very close to the zero line (i.e., to the semiclassical WK values). This is consistent with the results obtained in the previous section, where it was shown that for deformed systems where degeneracies are lifted the energy $E(N)$ is expected to be well approximated by the WK theory.

The magnitude of the difference δE of the minimized quantum solutions to the semiclassical values slightly increases with increasing particle number, as the average curve shows in Fig. 6. However, the magnitude of the same quantity δE divided by the particle number decreases as a function of increasing N , and the minimized deformed quantum energies per particle are extremely close to the semiclassical ones. Notice the opposite trend in Fig. 6 of the two average curves, with and without energy minimization. In contrast to the latter case, for which an explicit formula for the average behavior was developed and successfully checked in the previous section, we do not yet have an equivalent result for a self-bound system.

We are interested in checking whether this simplified HO scenario remains valid in realistic Hartree-Fock-type mean-field calculations. In Ref. [8] self-consistent calculations of the ground-state binding energy of atomic nuclei were carried out using the variational Wigner-Kirkwood method [27]. The nuclear interaction was described by the relativistic mean-field (RMF) meson exchange model [28]. Quantum calculations for the RMF model are available in the literature. In particular, a mass table of deformed (axially symmetric) quantum calculations for nuclei with an accurately calibrated RMF nuclear interaction is published in Ref. [29]. From this table we took for each value of the mass number A the *most bound* (in general deformed) isotope and traced E/A as a function of A [30]. The quantum values together with the

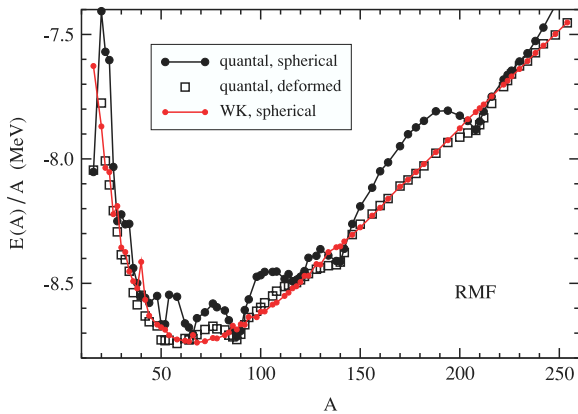


FIG. 7. (Color online) Energy per particle of atomic nuclei with an even number of protons and of neutrons along the periodic table, as obtained from self-consistent relativistic mean-field calculations. The deformed calculations are from Ref. [29]. For each value of the mass number A we plot the most bound isotope according to the tabulation of Ref. [29] (except for $A = 40$ [30]).

RMF semiclassical results, computed following Ref. [8], are shown in Fig. 7 for nuclei with an even number of protons and neutrons. Most of the WK energies lie on top of the deformed quantum energies on the scale of the figure. We plot in addition the RMF quantum values constrained to sphericity. The typical arch structure found in Fig. 2 for the spherical HO potential is then recovered. These arches in nuclei take place between the so-called magic numbers (i.e., the proton or neutron numbers where effects analogous to the shell closures of the HO or of the electron shells in atoms occur). The fact that for nuclei above iron E/A increases whereas in Fig. 2 it keeps decreasing is a trivial effect caused by to the Coulomb repulsion among protons in the atomic nucleus.

In Fig. 8 we display for the self-consistent RMF the difference δE between the quantum energies (which are, as mentioned, minimized with respect to deformation) and the

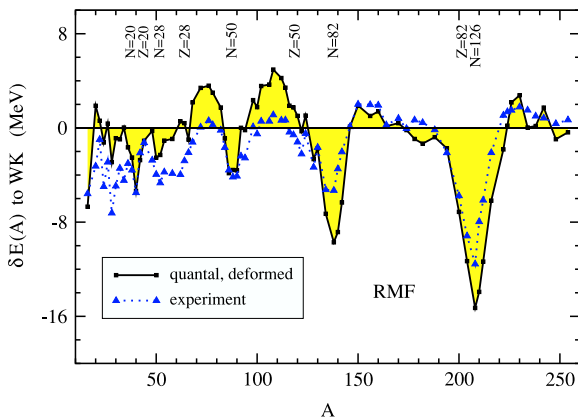


FIG. 8. (Color online) Energy difference between the deformed quantum solutions and the WK values of Fig. 7 for the self-consistent relativistic nuclear mean field. The result obtained by taking the difference of the experimental data [31] from the calculated WK energies is also shown for the purpose of illustration. The location of the magic neutron (N) and proton (Z) numbers is indicated.

corresponding semiclassical values (which attain their absolute minima at sphericity). For reference, the values of the energy difference δE obtained from experimental data [31] instead of the quantum results are also displayed. The similarity of Fig. 8 with Fig. 6 for the HO is striking. Systems with the largest deformations are again located mostly around midshells. When the system approaches spherical shape, δE becomes increasingly negative and displays the downward peaks seen in Fig. 8 on reaching neutron or proton magic numbers.

It is clear that in the self-consistent case as in the schematic case of the HO with optimized shapes considered here, the average of δE as a function of particle number is, at least for the heavier systems, negative. In self-bound systems we again find that in between shells the quantum energies are closer to the semiclassical WK values. In between shells the system deforms in search of minimum energy and avoids the large positive shell corrections to the energy that occur if a spherical shape is kept. As the deformation increases, symmetries are broken and the amplitude of the shell corrections diminishes. This is in agreement with the basic ideas underlying Eq. (23), which imply an energy $E(N)$ that is well approximated by the WK theory.

V. CONCLUDING REMARKS

In this work we have revisited the old problem of the semiclassical approach to finite fermion systems, based on either the Wigner-Kirkwood expansion with \hbar corrections or the Weyl expansion. We have addressed the nature of one of the most elusive features of the theory, namely the systematic overbinding compared to the quantum average for fermions in fixed potentials.

In the first part, we have shown that this discrepancy occurs because these methods do not incorporate appropriately conservation of particle number. There is, generically, a contribution to the average ground-state energy that comes from the fluctuating part, or shell contribution. We derived an explicit formula that takes into account that contribution, and we have tested it for different fixed confining potentials. In all cases, a positive correction with respect to the semiclassical result is predicted [cf Eq. (23)], whose magnitude depends on the size of the shell effects. When the confining potential has symmetries, the shell corrections are large, and important deviations between the exact quantum and the WK energies are observed, in agreement with our predictions. In contrast, when symmetries are broken, shell effects are smaller, and the exact energies (and not only their average part) are better described by the WK theory.

The description of the behavior of self-bound systems is more difficult and subtle, because at each particle number N the energy is minimized, and hence the shape of the potential is a function of N . In this case, a shell correction that is nearly always negative with respect to the spherical WK result is observed for the HO potential. In between shells, when the system deforms and symmetries are broken, the value of the shell correction is smaller, and the energy is well approximated by the WK theory, in agreement with the general considerations that follow from Eq. (23). Interestingly, all these features have been qualitatively confirmed by a more realistic

model based on a mean-field self-consistent calculation of the ground-state energy of atomic nuclei. However, the problem of deriving an explicit formula for the average behavior of the ground-state energy of self-bound systems that correctly takes into account the N dependence with deformation degrees of freedom is still open.

ACKNOWLEDGMENTS

We are indebted to R. K. Bhaduri and O. Bohigas for valuable information. This work is partially supported by IN2P3-CICYT. X.V. and M.C. acknowledge Grant Nos. FIS2005-03142 (MEC, Spain, and FEDER) and 2005SGR-00343 (Generalitat de Catalunya). P.L. and J.R. acknowledge support from grants ACI Nanoscience 201, ANR NT05-2-42103, and ANR-05-Nano-008-02 and from the IFRAF Institute.

APPENDIX

We follow here Appendix B of Ref. [32] to prove Eqs. (20) and (21).

Let us consider a single-particle spectrum ε_j , with $j = 1, 2, \dots$ and $\varepsilon_j \leq \varepsilon_{j+1}$. The accumulated level density $\mathcal{N}(\mu)$ is discontinuous at each energy level. At the discontinuity, we assign to $\mathcal{N}(\mu)$ the ‘‘intermediate’’ value $\mathcal{N}(\varepsilon_N) = N - 1/2$. For $N \gg 1$ and $\varepsilon_N < \mu < \varepsilon_{N+1}$, writing $\mathcal{N}(\mu) = \tilde{\mathcal{N}}(\mu) + \tilde{\mathcal{N}}(\mu)$, making a Taylor expansion of $\tilde{\mathcal{N}}(\mu)$ around ε_N , and using $\mathcal{N}(\varepsilon_N) = N - 1/2$, we may write

$$\tilde{\mathcal{N}}(\mu) = \tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_N) + \frac{1}{2} - (\mu - \varepsilon_N)\bar{g}. \quad (\text{A1})$$

Evaluating this relation just before $\mu = \varepsilon_{N+1}$, and taking into account the value of the function at ε_{N+1} , we have

$$\tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_{N+1}) = \tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_N) + 1 - s_N\bar{g}, \quad (\text{A2})$$

where

$$s_N = \varepsilon_{N+1} - \varepsilon_N$$

is the level spacing (where we neglect the dependence of \bar{g} with energy). Taking the discrete average over N on both sides of Eq. (A2), defined as

$$\langle f(\varepsilon_N) \rangle_N = \frac{1}{\Delta N} \sum_{j=N-\Delta N/2}^{N+\Delta N/2} f(\varepsilon_j),$$

where ΔN is the number of levels in the window around the N th level, and using $\langle \tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_{N+1}) \rangle_N = \langle \tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_N) \rangle_N$, we obtain the (trivial) relation $\langle s_N \rangle_N = 1/\bar{g}$.

Now, defining the continuous average over a window $\Delta\mu$ of a function that depends on the chemical potential as

$$\langle f(\mu) \rangle_\mu = \frac{1}{\Delta\mu} \sum_{j=N-\Delta N/2}^{N+\Delta N/2} \int_{\varepsilon_j}^{\varepsilon_{j+1}} f(\mu) d\mu,$$

where $\Delta N = \bar{g}\Delta\mu$ is the number of levels in the window, we have from Eq. (A1)

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\mathcal{N}}(\mu) \rangle_\mu &= \frac{1}{\Delta\mu} \sum_{j=N-\Delta N/2}^{N+\Delta N/2} \int_{\varepsilon_j}^{\varepsilon_{j+1}} [\tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_j) + 1/2 \\ &\quad - \bar{g}(\mu - \varepsilon_j)] d\mu \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\Delta N}{\Delta\mu} \left(\langle \tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_N) s_N \rangle_N + \frac{\langle s_N \rangle_N}{2} - \frac{\bar{g}}{2} \langle s_N^2 \rangle_N \right) \\ &= \bar{g} \left(\langle \tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_N) s_N \rangle_N + \frac{1}{2\bar{g}} - \frac{\bar{g}}{2} \langle s_N^2 \rangle_N \right) = 0. \end{aligned} \quad (\text{A3})$$

The last equality follows because $\langle \tilde{\mathcal{N}}(\mu) \rangle_\mu = 0$ by definition. From Eq. (A3) we deduce

$$\langle \tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_N) s_N \rangle_N = \frac{\bar{g}}{2} \langle s_N^2 \rangle_N - \frac{1}{2\bar{g}}. \quad (\text{A4})$$

By squaring and computing the discrete average in both sides of Eq. (A2) it is possible to deduce that $\langle \tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_N) \rangle_N = 0$ after using Eq. (A4).

Similarly, by squaring Eq. (A1) and computing in both sides the continuous average it is possible to relate the continuous variance of $\tilde{\mathcal{N}}(\mu)$ with discrete averages

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu &= \bar{g} \langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\varepsilon_N) s_N \rangle_N \\ &\quad - \bar{g}^2 \langle \tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_N) s_N^2 \rangle_N + \frac{\bar{g}}{3} \langle s_N^3 \rangle_N - \frac{1}{4}. \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

Computing the discrete average of the third power of Eq. (A2) considerably simplifies the previous expression for the continuous variance and gives

$$\langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\varepsilon_N) \rangle_N = \langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu - \frac{1}{12}. \quad (\text{A6})$$

We are now interested in the statistics at the discrete points $\mu_N = (\varepsilon_{N+1} + \varepsilon_N)/2$. From Eq. (A1) we have

$$\tilde{\mathcal{N}}(\mu_N) = \tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_N) + \frac{1}{2} - \frac{\bar{g}}{2} s_N, \quad (\text{A7})$$

from which it is easy to deduce that $\langle \tilde{\mathcal{N}}(\mu_N) \rangle_N = 0$. From the discrete average of the square of Eq. (A7), and by using the result (A4) as well as Eq. (A6), it follows that

$$\langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu_N) \rangle_N = \langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu + \frac{1}{6} - \frac{\bar{g}^2}{4} \langle s_N^2 \rangle_N. \quad (\text{A8})$$

We have demonstrated Eq. (21).

Let us now consider the grand potential for $N \gg 1$ and $\varepsilon_N < \mu < \varepsilon_{N+1}$. Since $\tilde{\Omega}(\mu) - \tilde{\Omega}(\varepsilon_N) = -\int_{\varepsilon_N}^{\mu} \tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon) d\varepsilon$, using Eq. (A1) and integrating we get

$$\tilde{\Omega}(\mu) = \tilde{\Omega}(\varepsilon_N) - \left(\tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_N) + \frac{1}{2} \right) (\mu - \varepsilon_N) + \frac{\bar{g}}{2} (\mu - \varepsilon_N)^2. \quad (\text{A9})$$

By noting that $\tilde{\Omega}(\mu)$ is a continuous function, Eq. (A9) at $\mu = \varepsilon_{N+1}$ gives

$$\tilde{\Omega}(\varepsilon_{N+1}) = \tilde{\Omega}(\varepsilon_N) - \left(\tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_N) + \frac{1}{2} \right) s_N + \frac{\bar{g}}{2} s_N^2. \quad (\text{A10})$$

In a similar way as was done for the accumulated level density, by integration of Eq. (A9) [knowing that $\langle \tilde{\Omega}(\mu) \rangle_\mu = 0$], and taking the discrete average of the product of Eq. (A2) and Eq. (A10), we deduce

$$\langle \tilde{\Omega}(\varepsilon_N) \rangle_N = \frac{1}{\bar{g}} \langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu. \quad (\text{A11})$$

From Eq. (A9), for $\mu = \mu_N$, we have

$$\tilde{\Omega}(\mu_N) = \tilde{\Omega}(\varepsilon_N) - \left(\tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon_N) + \frac{1}{2} \right) \frac{s_N}{2} + \frac{\bar{g}}{8} s_N^2. \quad (\text{A12})$$

The discrete average of this equation, together with

Eqs. (A4) and (A11), finally leads to

$$\langle \tilde{\Omega}(\mu_N) \rangle_N = \frac{1}{\bar{g}} \langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\mu) \rangle_\mu - \frac{\bar{g}}{8} \langle s_N^2 \rangle_N. \quad (\text{A13})$$

This equation, together with Eq. (A8), implies Eq. (20).

-
- [1] M. Brack and R. K. Bhaduri, *Semiclassical Physics* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1997).
- [2] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, Berlin, 1980).
- [3] V. M. Strutinsky, Nucl. Phys. **A95**, 420 (1967); **A122**, 1 (1968).
- [4] N. H. March, *Self-Consistent Fields in Atoms* (Pergamon, Oxford, 1975).
- [5] O. Bohigas, X. Campi, H. Krivine, and J. Treiner, Phys. Lett. **B64**, 381 (1976).
- [6] I. Zh. Petkov and M. V. Stoitsov, *Nuclear Density Functional Theory* (Clarendon Press, Oxford, 1991).
- [7] M. Centelles, X. Viñas, M. Barranco, and P. Schuck, Ann. Phys. (NY) **221**, 165 (1993).
- [8] M. Centelles, P. Schuck, and X. Viñas, Ann. Phys. (in press) [nucl-th/0601092].
- [9] F. A. Ivanyuk and V. M. Strutinsky, Z. Phys. A **293**, 337 (1979); F. A. Ivanyuk, *ibid.* **316**, 233 (1984).
- [10] K. Pomorski, Phys. Rev. C **70**, 044306 (2004).
- [11] B. L. Altshuler, Y. Gefen, and Y. Imry, Phys. Rev. Lett. **66**, 88 (1991).
- [12] S. Grossmann and M. Holthaus, Phys. Rev. Lett. **79**, 3557 (1997).
- [13] E. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932); J. G. Kirkwood, *ibid.* **44**, 31 (1933); G. E. Uhlenbeck and E. Beth, Physica **3**, 729 (1936).
- [14] H. P. Baltes and E. R. Hilf, *Spectra of Finite Systems* (Bibliographisches Institut-Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1976).
- [15] R. K. Bhaduri and C. K. Ross, Phys. Rev. Lett. **27**, 606 (1971).
- [16] M. Brack and H. C. Pauli, Nucl. Phys. **A207**, 401 (1973).
- [17] B. K. Jennings, Nucl. Phys. **A207**, 538 (1973).
- [18] B. K. Jennings, R. K. Bhaduri, and M. Brack, Nucl. Phys. **A253**, 29 (1975).
- [19] We use the notation $E = \bar{E} + \tilde{E}$, $\mathcal{N} = \bar{\mathcal{N}} + \tilde{\mathcal{N}}$, etc. to indicate the total, average, and fluctuating parts of each magnitude. However, in the axis labels of the figures where different approximations are compared, we shall write only E, \mathcal{N} , etc.
- [20] R. Balian and C. Bloch, Ann. Phys. (NY) **69**, 76 (1972).
- [21] M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **10**, 1004 (1969).
- [22] P. Leboeuf, Lect. Notes Phys. **652**, 245 (2004).
- [23] M. Brack and S. R. Jain, Phys. Rev. A **51**, 3462 (1995).
- [24] O. Bohigas and P. Leboeuf, Phys. Rev. Lett. **88**, 092502 (2002); **88** 129903 (2002).
- [25] H. Olofsson, S. Åberg, O. Bohigas, and P. Leboeuf, Phys. Rev. Lett. **96**, 042502 (2006).
- [26] P. Leboeuf and A. G. Monstra, Ann. Phys. (NY) **297**, 127 (2002).
- [27] M. Centelles, X. Viñas, M. Durand, P. Schuck, and D. Von-Eiff, Ann. Phys. (NY) **266**, 207 (1998).
- [28] B. D. Serot and J. D. Walecka, Adv. Nucl. Phys. **16**, 1 (1986).
- [29] G. A. Lalazissis, S. Raman, and P. Ring, At. Data Nucl. Data Tables **71**, 1 (1999).
- [30] We have made an exception to the rule of selecting the most bound isotope for each mass number in the case of $A = 40$. The most bound $A = 40$ nucleus is ^{40}Ar ($Z = 18, N = 22$). However, in Figs. 7 and 8 we display the results for ^{40}Ca instead of ^{40}Ar , because ^{40}Ca is one of the scarce examples of a stable nucleus with a double shell closure ($Z = N = 20$).
- [31] G. Audi, A. H. Wapstra, and C. Thibault, Nucl. Phys. **A729**, 337 (2003).
- [32] A. G. Monstra, Ph.D. thesis, Université Paris XI, 2001, <http://www.physik.tu-dresden.de/~monstra/CV.html>

Le deuxième article intitulé “*On the ground-state energy of finite Fermi systems*” [5] est un prolongement du précédent où l’on traite le cas plus difficile de la partie moyenne de $\tilde{E}(N)$ pour des gaz de Fermi auto-cohérents par le biais du modèle analytique du potentiel harmonique à 3 dimensions. Nous verrons en troisième partie que l’étude de cette valeur moyenne est en effet très importante pour comprendre le comportement de la densité de niveaux à N-corps des noyaux atomiques. De plus nous établissons des formules explicites pour $\tilde{E}(N)$ dans le cas de potentiels fixes avec déformations et pour un système auto-cohérent. Pour des potentiels fixes, nous confirmons l’importance des propriétés de théorie des nombres des fréquences pour l’étude des oscillateurs harmoniques [41, 42].

Ground-state energy of finite Fermi systems

Jérôme Roccia and Patricio Leboeuf

Laboratoire de Physique Théorique et Modèles Statistiques, CNRS, Bât. 100, Université de Paris-Sud, F-91405 Orsay Cedex, France

(Received 2 March 2007; published 2 July 2007)

We study the ground-state shell correction energy of a fermionic gas in a mean-field approximation. Considering the particular case of three-dimensional harmonic trapping potentials, we show the rich variety of different behaviors (erratic, regular, supershells) that appear when the number-theoretic properties of the frequency ratios are varied. For self-bound systems, where the shape of the trapping potential is determined by energy minimization, we obtain accurate analytic formulas for the deformation and the shell correction energy as a function of the particle number N . Special attention is devoted to the average of the shell correction energy. We explain why in self-bound systems it is a decreasing (and negative) function of N .

DOI: [10.1103/PhysRevC.76.014301](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.76.014301)

PACS number(s): 21.10.Dr, 03.65.Sq, 21.60.-n

I. INTRODUCTION

When estimating the ground-state energy of interacting Fermi gases, one can schematically rely on two different approaches. For few-particle systems (say, less than 10–20), direct *ab initio* calculations are available at present [1]. For larger systems, and in particular for global mass calculations in atomic nuclei, approximate schemes based on either mean-field calculations [2] or shell models [2,3] are inevitable. In mean-field theories, on which we focus here, the energy or mass of the system is naturally decomposed into a smooth part and a fluctuating part. Methods such as those based on the Thomas-Fermi (TF) or Wigner-Kirkwood theories provide an approximation to the smooth part [2,4], whereas the oscillatory shell structure may be described by semiclassical methods [4]. In practice, these two contributions may be well separated in a grand canonical scheme, where the energy is considered as a function of the chemical potential μ : the TF contribution describes the smooth dependence on chemical potential, whereas the oscillatory component has *zero average* (with respect to μ) and describes deviations with respect to the mean behavior.

In isolated systems with a well-defined number of particles N , things are different. When the dependence of the ground-state energy $E(N)$ is considered as a function of N , one can show [5] that its fluctuating part, $\tilde{E}(N)$, in contrast to usual expectations, has a nonzero average (as a function of N). It follows that the fluctuating part contributes to the smooth part $\bar{E}(N)$ of the energy, and the frontier between smooth and fluctuating components is blurred. This is a generic effect, although its importance depends on the symmetries (and intrinsic dynamics) of the mean-field potential. A description of this effect was recently developed [5] for a confining potential which keeps its shape fixed (up to a possible scaling factor) when the number of particles varies [(cf. Eq. (6) below].

Although the latter situation may be relevant in many experimental setups, such as cold dilute Fermi gases in magnetic atom traps [6], where the external HO potential dominates over the mean-field interaction energy [7], another relevant case is that of self-bound systems, such as the atomic nucleus. In these systems, an effect that was not included in the previous description appears: the shape of the average self-bound confining potential depends on the number of particles. As

is well known, at a given N the shape is determined by minimizing the energy of the system. The minimization of the smooth part of the energy leads generically to an isotropic shape. We denote this contribution $\bar{E}_{\text{sph}}(N)$. For that shape and for particular values of N (magic numbers), the contribution of the fluctuating part $\tilde{E}_{\text{sph}}(N)$ is large and negative, thus reducing the total energy with respect to $\bar{E}_{\text{sph}}(N)$. Away from magic numbers, the amplitude of $\tilde{E}_{\text{sph}}(N)$ rapidly decreases, and may eventually become positive. To avoid this behavior, the system deforms, trying to keep the value of the oscillating part of the self-bound energy $\tilde{E}_{\text{SB}}(N)$ negative and as large as possible. Though in most realistic situations $\tilde{E}_{\text{SB}}(N) \ll \bar{E}(N)$, the behavior of $\tilde{E}_{\text{SB}}(N)$ has a strong influence on the shape of the system. Schematically (see Fig. 4), the behavior of $\tilde{E}_{\text{SB}}(N)$ is therefore a fluctuating negative function of N , with larger amplitudes around the magic numbers.

It follows that in self-bound systems, as for Fermi gases confined by a fixed external potential, the average part of the energy fluctuations is again generically different from zero. However, the properties of the average are very different in these two cases. In particular, the average is positive for a fixed shape, while it is negative in self-bound systems. Such a bias toward negative energies of the fluctuating part in self-bound systems is clearly observed in realistic calculations [5]. In the bottom part of Fig. 5, we plot the nuclear ground-state shell correction energy computed in Ref. [8] using a macroscopic-microscopic model, whose results are in good agreement with experimental data. We do observe a tendency toward negative values, with a nonzero slope for the average part of the fluctuations. One of our purposes here is to provide a quantitative description of this effect.

We will consider the case of noninteracting fermions in three dimensions whose self-bound confining potential is assumed to have a quadratic harmonic shape. The reason for such a choice is purely technical, since it allows, to some extent, for an explicit analytic description. In spite of its simplicity, we will show that it provides a correct description of what is observed in more realistic calculations.

Harmonic potentials were intensively investigated in the past, starting with the Nilsson model of the nuclear deformation [9]. This is an integrable (separable) model. It is known that the statistical properties of its single-particle

TABLE I. Smooth part of single-particle level density for a triplet of frequencies of the three-dimensional harmonic potential as function of energy ϵ (first row), corresponding integrated level density up to energy μ (second row), and smooth part of ground-state energy of Fermi gas as function of number of particles N (last row).

$\bar{\rho}(\epsilon)$	$\frac{1}{Q_1 Q_2 Q_3} \left(\epsilon^2 - \frac{Q_1^2 + Q_2^2 + Q_3^2}{12} \right)$
$\bar{\mathcal{N}}(\mu)$	$\frac{1}{3Q_1 Q_2 Q_3} \left(\mu^3 - \frac{Q_1^2 + Q_2^2 + Q_3^2}{4} \mu \right)$
$\bar{E}(N)$	$\frac{1}{Q_1 Q_2 Q_3} \left(\frac{1}{4} (3Q_1 Q_2 Q_3 N)^{4/3} + \frac{Q_1^2 + Q_2^2 + Q_3^2}{24} (3Q_1 Q_2 Q_3 N)^{2/3} + \frac{(Q_1^2 + Q_2^2 + Q_3^2)^2}{2(12)^2} + \mathcal{O}(N^{-2/3}) \right)$

spectrum do not coincide with the generic (Poisson) behavior expected in integrable systems [10]. The statistics, explored mainly in $D = 2$, are in fact very sensitive to the number-theoretic properties of the frequency ratios [10,11]. As we will show, these number-theoretic properties also strongly influence the behavior of the many-body system.

Our analysis of the minimization of the energy of the Fermi gas will be based on a semiclassical theory. Though this theory is exact for the single-particle density of states, the different cases (of irrational or rational frequency ratios) should, however, be considered carefully [11]. We shall see that the amplitude and phase of shell effects are directly controlled by the number-theoretic properties of the frequencies. The output of the minimization problem thus depends on a delicate interplay between these number-theoretic properties and the number of particles in the gas.

The paper is organized as follows. In Sec. III, we study the main properties of $\bar{E}(N)$ for a harmonic potential of given frequency ratios. We will illustrate the large variety of different behaviors that could emerge (including shell and supershell structures). In Sec. IV, we deal with the case of self-bound systems and apply our results to a schematic model of the atomic nucleus (which we compare to realistic calculations).

II. GENERAL SETTING

For a given potential, the single-particle level density is decomposed into a smooth part $\bar{\rho}$ coming from the TF theory plus an oscillatory contribution $\tilde{\rho}$:

$$\rho(\epsilon) = \bar{\rho}(\epsilon) + \tilde{\rho}(\epsilon). \quad (1)$$

Here, ϵ is the single-particle energy. Below, we will show in more detail how to describe these two components. The spin degeneracy is included in the level density. Equation (1) induces a corresponding decomposition of the integrated level density (which counts the number of single-particle states up to an energy μ):

$$\mathcal{N}(\mu) = \bar{\mathcal{N}}(\mu) + \tilde{\mathcal{N}}(\mu) = \int_0^\mu \bar{\rho}(\epsilon) d\epsilon + \int_0^\mu \tilde{\rho}(\epsilon) d\epsilon. \quad (2)$$

To study a system with a finite number of particles, we use canonical expressions for thermodynamic quantities. For a

system of N noninteracting fermions, we define its ground-state energy $E(N)$, the shell correction energy $\tilde{E}(N)$, and the smooth TF component $\bar{E}(N)$ as [2,4]

$$\tilde{E}(N) = E(N) - \bar{E}(N) = \int_0^{\mu_N} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon - \int_0^{\bar{\mu}_N} \epsilon \bar{\rho}(\epsilon) d\epsilon. \quad (3)$$

The chemical potential μ_N and its smooth part $\bar{\mu}_N$ fix the number of particles. They are defined by inversion of the exact and average integrated level densities, $\mathcal{N}(\mu_N) = N$ and

$$\bar{\mathcal{N}}(\bar{\mu}_N) = N, \quad (4)$$

respectively. Unfortunately, Eq. (3) is difficult to exploit analytically because the discretization of μ_N is difficult to impose. From Eq. (3), it can be shown that neglecting terms of second order in the parameter $\mu - \bar{\mu}$, \tilde{E} may be approximated by [12,13]

$$\tilde{E}(N) \approx - \int_0^{\bar{\mu}_N} \tilde{\mathcal{N}}(\epsilon) d\epsilon. \quad (5)$$

This, together with the definition of $\bar{E}(N)$, are the basic equations upon which our analysis of ground-state energies of Fermi gases will be based.

If in Eq. (5), $\bar{\mu}_N$ is considered as a continuous variable, it can easily be shown that it gives a wrong result for the average of the fluctuating function $\tilde{E}(N)$. Indeed, in a system with a fixed number of particles, the chemical potential takes discrete values as N varies. The fluctuating part of the ground-state energy is sampled at particular values of the chemical potential, implying a modification of its average value. Recently, an explicit description for this effect was given. It was found that the contribution of the fluctuating part to the average of the energy is given by [5]

$$\langle \tilde{E}(N) \rangle_N \approx \langle \tilde{\mathcal{N}}^2(\bar{\mu}_N) \rangle_{\bar{\mu}_N} / \bar{\rho}(\bar{\mu}_N), \quad (6)$$

where we use brackets to denote an average over an appropriate chemical potential window and to distinguish this contribution with respect to the TF smooth term.

TABLE II. Different cases of three-dimensional harmonic potential studied in Sec. III, with oscillating part of single-particle level density for a triplet of frequencies as a function of the energy ϵ (first row; from Ref. [11]), corresponding integrated level density up to energy μ (second row), oscillating part of the ground-state energy of the Fermi gas as a function of number of particles N (third row), analytic expression for the average of \tilde{E} (fourth row), and when available, analytic curve for the envelope of the magic numbers (last row).

A. Triaxial case with irrational frequencies	B. Isotropic case	C. Triaxial case with rational frequencies
$\tilde{\rho}(\epsilon) = \frac{1}{Q_1} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos(2\pi k\epsilon/Q_1)}{\sin(\pi k Q_2/Q_1) \sin(\pi k Q_3/Q_1)}$ $+ \frac{1}{Q_2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos(2\pi k\epsilon/Q_2)}{\sin(\pi k Q_1/Q_2) \sin(\pi k Q_3/Q_2)}$ $+ \frac{1}{Q_3} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos(2\pi k\epsilon/Q_3)}{\sin(\pi k Q_1/Q_3) \sin(\pi k Q_2/Q_3)}$	$2\epsilon^2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \cos(2\pi k\epsilon)$	$\tilde{\rho}_I(\epsilon) + \tilde{\rho}_T(\epsilon)$ $\tilde{\rho}_I(\epsilon) = \frac{2\epsilon^2}{Q_1 Q_2 Q_3} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k(Q_1+Q_2+Q_3)} \cos(2\pi k\epsilon)$ $\tilde{\rho}_T(\epsilon) = \frac{1}{Q_1} \sum_{k \neq l Q_1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos(2\pi k\epsilon/Q_1)}{\sin(\pi k Q_2/Q_1) \sin(\pi k Q_3/Q_1)}$ $+ \frac{1}{Q_2} \sum_{k \neq l Q_2}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos(2\pi k\epsilon/Q_2)}{\sin(\pi k Q_1/Q_2) \sin(\pi k Q_3/Q_2)}$ $+ \frac{1}{Q_3} \sum_{k \neq l Q_3}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos(2\pi k\epsilon/Q_3)}{\sin(\pi k Q_1/Q_3) \sin(\pi k Q_2/Q_3)}$
$\tilde{N}(\mu) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \sin(2\pi k\mu/Q_1)}{k \sin(\pi k Q_2/Q_1) \sin(\pi k Q_3/Q_1)}$ $+ \frac{1}{2\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \sin(2\pi k\mu/Q_2)}{k \sin(\pi k Q_1/Q_2) \sin(\pi k Q_3/Q_2)}$ $+ \frac{1}{2\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \sin(2\pi k\mu/Q_3)}{k \sin(\pi k Q_1/Q_3) \sin(\pi k Q_2/Q_3)}$	$\frac{\mu^2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{\sin(2\pi k\mu)}{k}$	$\tilde{N}_I(\mu) + \tilde{N}_T(\mu)$ $\tilde{N}_I(\mu) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k(Q_1+Q_2+Q_3)} \mu^2 \sin(2\pi k\mu)}{\pi k Q_1 Q_2 Q_3}$ $\tilde{N}_T(\mu) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k \neq l Q_1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \sin(2\pi k\mu/Q_1)}{k \sin(\pi k Q_2/Q_1) \sin(\pi k Q_3/Q_1)}$ $+ \frac{1}{2\pi} \sum_{k \neq l Q_2}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \sin(2\pi k\mu/Q_2)}{k \sin(\pi k Q_1/Q_2) \sin(\pi k Q_3/Q_2)}$ $+ \frac{1}{2\pi} \sum_{k \neq l Q_3}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \sin(2\pi k\mu/Q_3)}{k \sin(\pi k Q_1/Q_3) \sin(\pi k Q_2/Q_3)}$
$\tilde{E}(N) = \frac{Q_1}{4\pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos(2\pi k(3Q_2 Q_3 N/Q_1^2)^{1/3})}{k^2 \sin(\pi k Q_2/Q_1) \sin(\pi k Q_3/Q_1)}$ $+ \frac{Q_2}{4\pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos(2\pi k(3Q_1 Q_3 N/Q_2^2)^{1/3})}{k^2 \sin(\pi k Q_1/Q_2) \sin(\pi k Q_3/Q_2)}$ $+ \frac{Q_3}{4\pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos(2\pi k(3Q_1 Q_2 N/Q_3^2)^{1/3})}{k^2 \sin(\pi k Q_1/Q_3) \sin(\pi k Q_2/Q_3)}$	$\frac{(3N)^{2/3}}{2\pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^2} \cos(2\pi k(3N)^{1/3})$	$\tilde{E}_I(N) + \tilde{E}_T(N)$ $\tilde{E}_I(N) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k(Q_1+Q_2+Q_3)} (3N)^{2/3} \cos(2\pi k(3Q_1 Q_2 Q_3 N)^{1/3})}{2\pi^2 (Q_1 Q_2 Q_3)^{1/3} k^2}$ $\tilde{E}_T(N) = \frac{Q_1}{4\pi^2} \sum_{k \neq l Q_1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos(2\pi k(3Q_2 Q_3 N/Q_1^2)^{1/3})}{k^2 \sin(\pi k Q_2/Q_1) \sin(\pi k Q_3/Q_1)}$ $+ \frac{Q_2}{4\pi^2} \sum_{k \neq l Q_2}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos(2\pi k(3Q_1 Q_3 N/Q_2^2)^{1/3})}{k^2 \sin(\pi k Q_1/Q_2) \sin(\pi k Q_3/Q_2)}$ $+ \frac{Q_3}{4\pi^2} \sum_{k \neq l Q_3}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos(2\pi k(3Q_1 Q_2 N/Q_3^2)^{1/3})}{k^2 \sin(\pi k Q_1/Q_3) \sin(\pi k Q_2/Q_3)}$
$\langle \tilde{E}(N) \rangle_N \propto N^{-2/3}$	$\frac{1}{24} (3N)^{2/3}$	$\frac{(3N)^{2/3}}{24(Q_1 Q_2 Q_3)^{1/3}}, \text{ for } \mathcal{R}_T \ll 1$ $\propto N^{-2/3}, \text{ for } \mathcal{R}_T \gg 1$
$\tilde{E}_{MAGIC}(N)$	$-\frac{1}{24} (3N)^{2/3}$	$\frac{-(3N)^{2/3}}{24(Q_1 Q_2 Q_3)^{1/3}}, \text{ for } \mathcal{R}_T \ll 1$

III. EXTERNAL POTENTIALS

A. Triaxial case with irrational frequencies

We consider a particle in a three-dimensional harmonic potential. The Hamiltonian is given by

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{1}{2}(Q_1^2 x^2 + Q_2^2 y^2 + Q_3^2 z^2), \quad (7)$$

where all quantities are dimensionless (units $\hbar = m = 1$). Q_1 , Q_2 , and Q_3 are the frequencies of the harmonic oscillator (HO). In this subsection, we considered them as incommen-

surable real numbers with pairwise irrational ratios. Using Eq. (2) and the expression of the TF level density $\tilde{\rho}$ given in Table I, we calculate from Eq. (4) the smooth chemical potential to leading order in N :

$$\tilde{\mu}_N = (3Q_1 Q_2 Q_3 N)^{1/3}. \quad (8)$$

For irrational frequency ratios, the only periodic orbits of the system are the one-dimensional oscillations along the three principal axes x , y , and z . These orbits are isolated and are the backbone for the description of the fluctuating part of

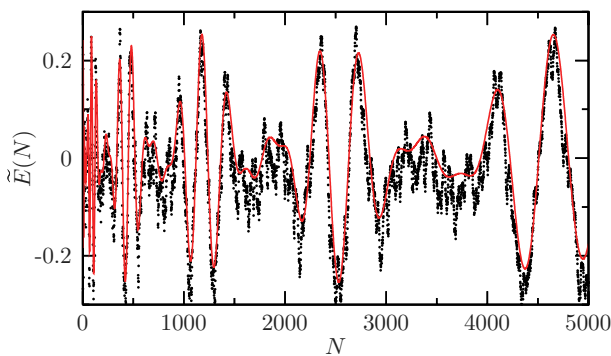


FIG. 1. (Color online) Ground-state shell correction energy as a function of N for $Q_1 = \sqrt{2}$, $Q_2 = \sqrt{3}$, and $Q_3 = \sqrt{5}$. Quantum computation (dots) and theoretical prediction (see Table II) using the first term in each sum (solid line).

the different quantities. In particular, the single-particle level density $\tilde{\rho}(\epsilon)$ was computed in Ref. [11] (using semiclassical methods based on the trace formula, which coincide with exact results obtained from the inverse Laplace transform of the exact partition function). From Eqs. (2) and (5), and the previous expression (8) of $\tilde{\mu}_N$, we compute analytically the expressions for $\tilde{N}(\mu)$ and $\tilde{E}(N)$. These, together with that of $\tilde{\rho}$ (see Ref. [11]), are reported in Table II (first column, case A).

From periodic orbit theory (POT), it is known that the main features of the shell correction energy can be recovered by taking into account only the first (shortest) orbits [13], which correspond to the first terms in each of the three sums (lowest k values) of $\tilde{E}(N)$. As the number of particles N is varied, the interferences between these terms produce an oscillatory pattern. For potentials in which the single-particle spectrum has a simple structure, such as the isotropic HO discussed in the next subsection, the oscillatory pattern of the energy as a function of N will be quite regular. One speaks in that case of shell effects and magic numbers (which correspond to the minima of the regular oscillation). In the present case of irrational frequency ratios, the structure of the single-particle spectrum is highly nontrivial and leads to a complicated pattern of oscillations of the energy as a function of N . This is illustrated for a particular case in Fig. 1. The full line is obtained from the corresponding equation of Table II, using only the first term in each sum ($k = 1$). Although details are missing, note the good overall agreement obtained with just three orbits. Note the absence of regularity of the pattern.

As the classical orbits for irrational frequencies do not form families but are instead isolated, the amplitude of the fluctuations is small (compared with the results of, e.g., the isotropic case of the next subsection, see Fig. 2). The purely quantum mechanical counterpart of this statement is that because of the absence of symmetries in the system, no systematic degeneracies occur in the single-particle spectrum, fluctuations are small, and accordingly the energy does not deviate significantly from its average part. Moreover, the typical value of \tilde{N} is also small, and we find a correction to the mean value coming from the oscillatory part, calculated from Eq. (6), that vanishes as $N^{-2/3}$ (see Ref. [5] for further details of the method).

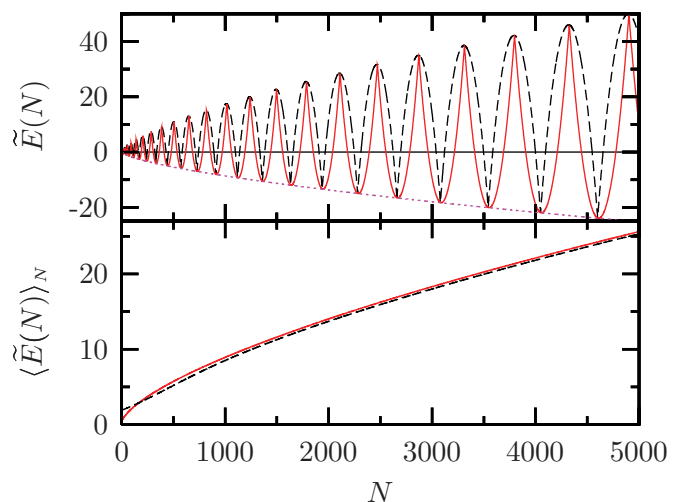


FIG. 2. (Color online) Upper panel: Ground-state shell correction energy as a function of N for the isotropic HO, showing quantum computation (dashed line), semiclassical theoretical prediction (solid line), and analytical expression of the minima of \tilde{E} (dotted line; see last row of Table II). Lower panel: Numerical average of the exact fluctuating function of the upper panel (dashed line), compared with the theoretical prediction, Eq. (6) (full line; from Ref. [5]).

B. Isotropic case

Let us consider now the case $Q_1 = Q_2 = Q_3 = 1$. The system possesses the $U(3)$ symmetry. Within POT, a perturbative approach of the irrational case allows us to compute the level density [11], to obtain the well-known result given in the top row of the second column of Table II. To compute $\tilde{N}(\mu)$ and $\tilde{E}(N)$, we followed the method explained above (see the results in the second column of Table II). The high degree of symmetry of the system leads in this case to a single characteristic period for the periodic orbits, implying a much more regular pattern of the shell oscillations (compare the upper part of Fig. 2 with Fig. 1). With respect to the triaxial irrational case, the amplitude of the fluctuations is much larger (this is related to the high degeneracy of the energy levels or, semiclassically, to the fact that the periodic orbits form families). The approximate frequency of the shell fluctuations is given by the phase of the cosine function of the first $k = 1$ term of the sum in $\tilde{E}(N)$. Thus, magic numbers, given by the values of N that minimize $\tilde{E}(N)$, are well approximated by

$$N_{\text{magic}} = \frac{i^3}{3}, \quad \text{where } i \in \mathbb{N}^*, \quad (9)$$

which corresponds to integer values of the chemical potential $\tilde{\mu}_N$.

Classically, all the orbits are closed (periodic) and have the same period. This high degeneracy of the periodic orbits is reflected in the prefactor $N^{2/3}$ in front of $\tilde{E}(N)$ (cf. Table II), as compared with the case of irrational ratios. Because there is only one characteristic frequency associated with the periodic orbits, no beating effects are observed, and the fluctuations are very regular (forming “shells”). In particular, no supershell structure is present, such as the characteristic beating pattern

observed in a spherical cavity with hard walls, produced by the interference between the triangular and square orbits, see Refs. [4,14].

In Fig. 2, we clearly see that the average of $\tilde{E}(N)$ is nonzero and positive and increases as N increases. Using in Eq. (6) the corresponding expression for $\tilde{N}(\tilde{\mu}_N)$, we get an analytical expression for $\langle \tilde{E}(N) \rangle_N$ (cf. fourth row of Table II, and Ref. [5] for further details). Theory and numerics are compared in the bottom part of that figure.

C. Triaxial case with rational frequencies

Now Q_1, Q_2 , and Q_3 are positive integers and have pairwise irreducible ratios. Since frequencies are integer, the triaxial case produces families of classical periodic orbits (Lissajous figures). A perturbative treatment, similar to the isotropic case, can be done to obtain an explicit expression for the level density [11]. For convenience, the oscillating part of the level density is decomposed into two different parts (see Table II): $\tilde{\rho}_i$ ($\tilde{\rho}_T$) which is connected to the level density of the isotropic (triaxial with irrational frequency ratios) HO. Below, these two components are referred to as “isotropic” and “triaxial,” respectively. We follow the same method as before to obtain expressions for $\tilde{N}(\mu)$ and $\tilde{E}(N)$ (cf. third column of Table II).

To understand in this case the N dependence of the fluctuating part of the energy, it is useful to calculate the ratio

$$\mathcal{R}_T = \frac{\Lambda_T}{\Lambda_I} \quad (10)$$

of the typical amplitude of the triaxial component with respect to the isotropic one. These two amplitudes are approximated here by computing the amplitude of the first term $k = 1$ of the corresponding sum (cf. Table II), that is,

$$\Lambda_I = \frac{(3N)^{2/3}}{2\pi^2(Q_1 Q_2 Q_3)^{1/3}}, \quad (11)$$

$$\Lambda_T = \max \left(\begin{array}{l} Q_1/(4\pi^2 |\sin(\pi Q_2/Q_1) \sin(\pi Q_3/Q_1)|) \\ Q_2/(4\pi^2 |\sin(\pi Q_1/Q_2) \sin(\pi Q_3/Q_2)|) \\ Q_3/(4\pi^2 |\sin(\pi Q_1/Q_3) \sin(\pi Q_2/Q_3)|) \end{array} \right). \quad (12)$$

A finer estimate of Λ_T requires an analysis of the number-theoretic properties of the k th dependence of the denominators in \tilde{E}_T , which we shall not do here. Since for given frequencies, Λ_T is a constant independent of N , $\mathcal{R}_T \propto N^{-2/3}$. Thus, for any rational set of frequencies, there exists a critical number of particles N_c above which the behavior of $\tilde{E}(N)$ is dominated by the isotropic component. In this high- N regime, the behavior of $\tilde{E}(N)$ qualitatively coincides, up to a rescaling of the overall amplitude by $(Q_1 Q_2 Q_3)^{-1/3}$ and of a rescaling of the phase by $(Q_1 Q_2 Q_3)^{1/3}$, with the behavior of the isotropic HO described in the Sec. III B. This corresponds to a regular (i.e., single-frequency) pattern of large amplitude oscillations (or shells), with clearly defined magic numbers, as a function of N (compare Fig. 2 and the lower right panel of Fig. 3). The value of the magic numbers may be estimated similarly to

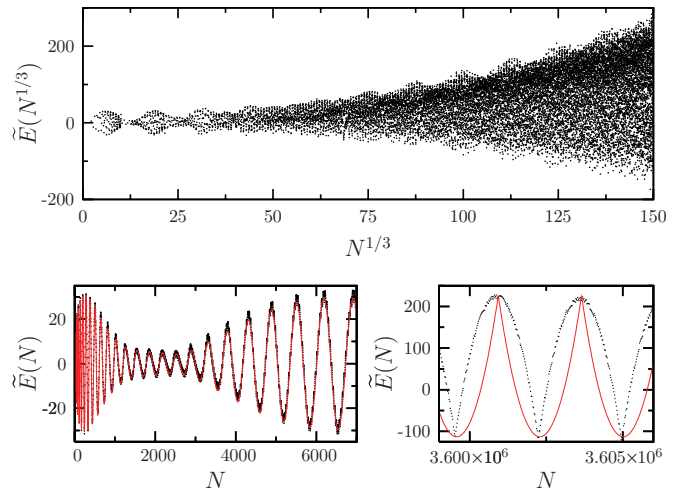


FIG. 3. (Color online) Upper panel: Ground-state shell correction energy as function of $N^{1/3}$ for $Q_1 = 17$, $Q_2 = 18$, and $Q_3 = 19$, and numerical computation (dots). We observe triaxial to isotropic transition for $\mathcal{R}_T \sim 1$, which corresponds to $N_c = 131\,060$ (or $N_c^{1/3} \sim 51$). Lower left panel: Magnification of the upper panel for low values of N ($\mathcal{R}_T > 7$); numerical computation (dots) and analytical expression of \tilde{E}_T with the first term in each sum (solid line). The triaxial component of \tilde{E} dominates and shows supershell effects due to interferences of the shortest orbits. Lower right panel: Magnification of the upper panel for $N^{1/3} \sim 150$ ($\mathcal{R}_T \sim 0.11$); numerical computation (dots) and analytical expression of \tilde{E}_I (solid line). The isotropic component of \tilde{E} dominates. Behavior is similar to the isotropic case of Fig. 2.

the previous subsection. This behavior illustrates the occurrence of an increasing number of accidental degeneracies in the single-particle spectrum as N increases (as already pointed out in Ref. [10] in the two-dimensional case). This qualitative behavior is also valid for the axial symmetric case, where two integer frequencies are equal.

In contrast, in the limit $\mathcal{R}_T \gg 1$ ($N \ll N_c$), $\tilde{E}(N)$ is controlled by the triaxial term of the shell energy \tilde{E}_T . As in the irrational case, the fluctuating part of the energy is now characterized by a roughly constant (and small, compared to the isotropic case) amplitude, with the gross features of the oscillations well approximated by the superposition of a small number of terms having different frequencies. In particular, for some triplets of frequencies, in the regime $N < N_c$ supershell-like structures may be observed, as illustrated for instance in Fig. 3.

In summary, in the triaxial rational case generically a transition at $\mathcal{R}_T \sim 1$ ($N \sim N_c$) from a triaxial regime ($\mathcal{R}_T \gg 1$, $N \ll N_c$) toward an isotropic behavior ($\mathcal{R}_T \ll 1$, $N \gg N_c$) is expected as N increases. This behavior is illustrated for a particular set of frequencies in Fig. 3, where the transition $\mathcal{R}_T \sim 1$, estimated from Eqs. (10)–(12), occurs at $N_c \sim 131\,060$. The lower left and right panels of Fig. 3 focus on the two extreme limits.

Though we have not studied all the possible cases (axial symmetry, rational-irrational, etc.), the above examples illustrate the variety of behaviors of energy fluctuations one can find as the frequency ratios are varied.

IV. SELF-BOUND SYSTEMS

Up to now, we have considered noninteracting fermions in HO potentials that keep their shape (frequencies) fixed as the number of fermions is varied. Such a scheme is a good approximation for dilute Fermi gases in optical traps [7], or in quantum dots, where the external potential dominates over the mean-field interaction energy [7]. But self-bound systems, such as metallic clusters or atomic nuclei, behave differently. In those systems, the shape of the self-consistent mean-field potential, determined from the minimization of the ground-state energy with respect to deformations, may strongly depend on the number of particles N .

If the HO potential considered here is viewed as the self-consistent mean-field potential, then at each N the energy is minimized with respect to the three frequencies. Conservation of the volume implies that the product of the three frequencies remains constant [3], $Q_1 Q_2 Q_3 = \text{constant}$. The constant can in fact be a function of N , to mimic for instance the approximately constant nuclear density. But this acts as a multiplicative factor which can be absorbed into the frequencies. Hence, without loss of generality, we normalize this constant to unity.

In the following, we consider only axial symmetric deformations ($Q_1 = Q_2$). This simplification, though not exact, is known to provide a good approximation in most nuclear cases. We use the axially symmetric expression of the oscillating part of the energy computed analogously to the previous sections, with Q_1 and Q_3 two incommensurable real numbers with pairwise irrational ratio, and imposing the volume conservation. There is thus only one free parameter (Q_1), and we obtain

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{\text{SB}}(N) = & \frac{(3N)^{1/3}}{2\pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin[2\pi k(3N)^{1/3}/Q_1]}{k^2 \sin(\pi k/Q_1^3)} \\ & + \frac{1}{4\pi^2 Q_1^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos(\pi k/Q_1^3) \cos[2\pi k(3N)^{1/3}/Q_1]}{k^2 \sin^2(\pi k/Q_1^3)} \\ & + \frac{1}{4\pi^2 Q_1^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cos[2\pi k(3N)^{1/3} Q_1^2]}{k^2 \sin^2(\pi k Q_1^3)}. \end{aligned} \quad (13)$$

Using similar arguments as in previous sections, we keep only the first term in each sum of Eq. (13). Besides, as we must minimize the energy with respect to Q_1 , the latter is a function of N . The term which comes from the first sum has the largest amplitude (this will be confirmed *a posteriori*, when the N dependence of Q_1 will be known) [15]. So we can remove all other contributions from Eq. (13), keeping the simple approximation

$$\tilde{E}_{\text{SB}}(N) = (3N)^{1/3} \frac{\sin[2\pi(3N)^{1/3}/Q_1]}{2\pi^2 \sin(\pi/Q_1^3)}. \quad (14)$$

For the minimization, we need also to evaluate $\bar{E}(N)$. The approximated (leading-order) TF chemical potential Eq. (8) used until now is not sufficiently accurate, because it leads to a wrong TF ground state: the minimum of \bar{E} does not give an isotropic shape. To obtain a better description of \bar{E} , we must improve the calculation of $\bar{\mu}_N$. This implies solving the full cubic equation given by the canonical condition

$\bar{N}(\bar{\mu}_N) = N$. We have done that using Cardano's formula [16], and we obtained the result presented in the third row of Table I. Then, the analytic expression for the energy to be minimized is

$$\begin{aligned} E(N) = & \frac{(3N)^{4/3}}{4} + \frac{(3N)^{2/3}}{24} \theta^{-2/3} (2 + \theta^2) + \frac{\theta^{-4/3}}{2(12)^2} (2 + \theta^2)^2 \\ & + \frac{(3N)^{1/3} \sin[2\pi(3N\theta)^{1/3}]}{2\pi^2 \sin(\pi\theta)}, \end{aligned} \quad (15)$$

where

$$\theta = Q_3/Q_1 = Q_1^{-3}. \quad (16)$$

We assume now that the frequency ratio has the perturbative form $\theta = 1 + \varepsilon$, where $\varepsilon \ll 1$ (small deformations). Since we know that close to magic numbers the system is spherical, we are interested in the behavior in between shells. We thus concentrate our analysis of shell effects for values of N close to the middle of the shells. From Eq. (15), we find that the middle of the shells correspond approximately to values of N given by $(3N)^{1/3} = (2i + 1)/2$, where $i \in \mathbb{N}$. Hence for these values of N , using a Taylor expansion of $\theta^{1/3}$ and the addition formula of the sine function, we get for the fluctuating part of the energy

$$\tilde{E}_{\text{SB}}(N) = \frac{(3N)^{1/3}}{2\pi^3 \varepsilon} \sin\left(\frac{2\pi(3N)^{1/3} \varepsilon}{3}\right). \quad (17)$$

This equation is the leading order in ε of Eq. (15) (the smooth part is of lower order). The minimization of the energy is thus equivalent to the minimization of the function (17). We cancel the derivative of Eq. (17) to obtain

$$\frac{2\pi(3N)^{1/3} \varepsilon}{3} = \tan\left(\frac{2\pi(3N)^{1/3} \varepsilon}{3}\right). \quad (18)$$

Note that $-\varepsilon$ is also a solution of Eq. (18) (prolate-oblate symmetry). Even though Eq. (18) has many solutions, we keep of course the one that gives the smallest value of the function (17). We solved numerically this equation for ε and find that the solution is well approximated by

$$\varepsilon(N) = \pm 1.49 N^{-1/3}, \quad (19)$$

which gives, for the self-bound energy fluctuations at midshell,

$$\tilde{E}_{\text{SB}}(N) = -0.0152 N^{2/3}. \quad (20)$$

We have tested numerically these results (cf. Fig. 4). They give a very good approximation of $\tilde{E}_{\text{SB}}(N)$ in the midshell region, showing that the axially symmetric deformation is a good approximation. The weight of the fluctuating term at midshell is thus proportional to $N^{2/3}$, with a negative slope. This has the same N dependence as the amplitude of the fluctuating part of an isotropic HO (whereas an axial-symmetric fixed potential yields instead a $N^{1/3}$ dependence) or to the subleading, surface term of the smooth part. This enhancement shows the fundamental importance of the N dependence of the frequencies.

Beyond this simple approximation, we have also found a phenomenological expression of ε which turns out to be a quite good approximation of the deformation for arbitrary N (see

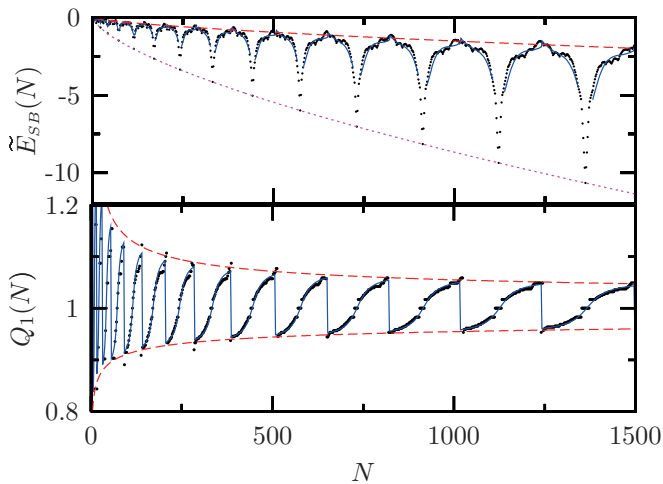


FIG. 4. (Color online) Upper panel: Oscillating part of the ground-state energy as a function of N computed numerically by the minimization of the energy of the free triaxial HO (dots). Also, plots of Eq. (14) (solid line) using the phenomenological expression (21) for ε and analytic results for \tilde{E}_{SB} valid at midshells, Eq. (20) (dashed line) and for \tilde{E}_{SB} for the magic numbers (Table II, case B, last row) (dotted line). Lower panel: $Q_1 = (1 + \varepsilon)^{-1/3}$ as a function of N computed numerically by the minimization of the energy of the free triaxial HO (dots). Also, plots of Q_1 using the phenomenological expression (21) for ε (solid line) and the midshell approximation (19) (dashed line).

bottom part of Fig. 4), that is,

$$\varepsilon(N) = -\frac{\pi}{2(3N)^{1/3}} \arctan\left(2\pi\left\{(3N)^{1/3} - \left[(3N)^{1/3} + 1/2\right]\right\}\right), \quad (21)$$

where here and in Eq. (22) $[a]$ denotes the integer part of a . This equation shows that up to a global damping factor $\propto N^{-1/3}$, the deformation is a strictly periodic function of the variable $x = (3N)^{1/3}$, of period $\Delta x = 1$ (the same is valid for the shell correction energy). It gives an extremely accurate description of the N dependence of the frequency, $Q_1 = [1 + \varepsilon(N)]^{-1/3}$, see Fig. 4. Increasing the particle number N from the value of a magic number (corresponding to $Q_1 = 1$), the frequency initially increases, $Q_1 > 1$, corresponding to a prolate shape (accordingly, $Q_3 < 1$). At midshell, the shape suddenly changes from prolate, $Q_1 > 1$, to oblate, $Q_1 < 1$, keeping its deviation from isotropy $|Q_1 - 1|$ constant. As N further increases, Q_1 diminishes, to arrive finally at $Q_1 = 1$ again at the next magic number. The cycle starts again, with a decreasing overall amplitude.

Replacing Eq. (21) in Eq. (14), we obtain a rather good approximation of $\tilde{E}_{\text{SB}}(N)$, see Fig. 4. Using the approximation $\varepsilon \ll 1$, $\tilde{E}_{\text{SB}}(N)$ can be written

$$\tilde{E}_{\text{SB}}(N) = \frac{(3N)^{2/3} \sin\left(2\pi(3N)^{1/3}(1 + \varepsilon(N))^{1/3}\right)}{\pi^4 \arctan\left(2\pi\left\{(3N)^{1/3} - \left[(3N)^{1/3} + 1/2\right]\right\}\right)}, \quad (22)$$

where $\varepsilon(N)$ is given by Eq. (21). The results obtained with this equation are very similar to those of Eq. (14), shown in Fig. 4. This equation clearly shows the scaling $N^{2/3}$ of $\tilde{E}_{\text{SB}}(N)$. Both the numerator and the denominator in Eq. (22) are functions of

N that oscillate around 0. The completely different behavior of $\tilde{E}_{\text{SB}}(N)$ (a negative decreasing function, see Fig. 4) comes from a delicate balance between both oscillatory functions. Close to magic numbers, the amplitude of Eq. (22), not shown in the figure, is smaller than the numerical results; further corrections need to be included to improve in this region.

We can check that the amplitude Λ_1 of Eq. (22) [first term of the first sum in Eq. (13)] is dominant with respect to the amplitudes Λ_2 and Λ_3 of the first terms of the two remaining sums in Eq. (13), respectively. Using $Q_1^{-3} = \theta = 1 + \varepsilon$, the value of ε given by Eq. (19), and keeping only the first term of a Taylor expansion in ε of the sine function in the denominators, one can easily check that $\Lambda_2/\Lambda_1 = \Lambda_3/\Lambda_1 \approx 0.07$. This justifies the approximation used.

Because the study of $E(N)$ for the self-bound system is a minimization problem, we are not able to compute an explicit and general expression for the average of the fluctuating part of the energy, analogous to Eq. (6) but now valid for self-bound systems. Nevertheless, it follows from the previous results that the average scales as $N^{2/3}$. A numerical fit of the average of \tilde{E}_{SB} , denoting

$$\langle \tilde{E}_{\text{SB}}(N) \rangle_N = -a_{\text{fit}} N^{2/3}, \quad (23)$$

gives $a_{\text{fit}} = 0.0262$.

As an application of the previous results, we consider a schematic model of the atomic nucleus, with N noninteracting neutrons and N uncharged noninteracting protons whose mean-field potential is assumed to have an HO shape. To mimic the saturation properties of nuclear forces and get dimensional quantities, we multiply \tilde{E}_{SB} by the factor $82A^{-1/3}$ MeV, where $A = 2N$ is the mass number [2]. The previous factor modifies the N dependence of the amplitude of \tilde{E}_{SB} , leading to an amplitude now proportional to $N^{1/3}$, instead of $N^{2/3}$. The energy is minimized as previously.

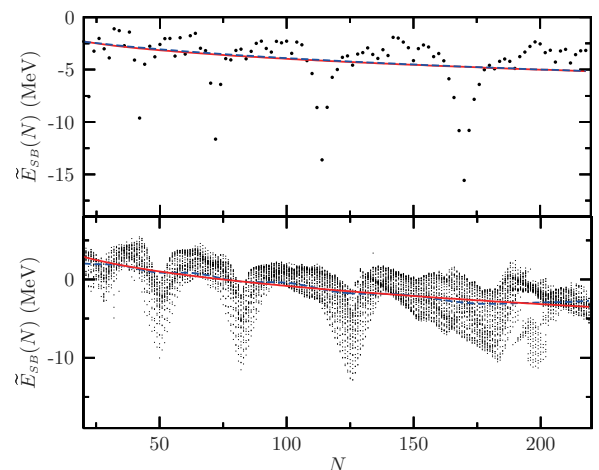


FIG. 5. (Color online) Upper panel: Numerical computation of \tilde{E}_{SB} as a function of the neutron number for the HO atomic nucleus model (dots), with numerical average of \tilde{E}_{SB} (dashed line) and phenomenological result adapted from Eq. (23): $\langle \tilde{E}_{\text{SB}}(N) \rangle_N = -1.71N^{1/3}$ MeV (solid line). Lower panel: Ground-state shell correction energy as a function of neutron number from Ref. [8] (dots), with numerical average of \tilde{E}_{SB} (dashed line) and phenomenological fit: $\langle \tilde{E}_{\text{SB}}(N) \rangle_N = (8.14 - 1.93N^{1/3})$ MeV (solid line).

We compare the results of this model with those of one of the best theoretical models for the nuclear binding energy, based on an extension of the liquid drop model [8], see Fig. 5. The smooth part used in Ref. [8] was different from ours, so it leads to a difference in the offset. In spite of that, we see that the qualitative properties of the simplified HO model, including the energy scale, are correct. In both cases, we plot the numerical average of \bar{E}_{SB} . A negative slope of the fit in Ref. [8], consistent with $-a_{\text{sw}}N^{1/3}$, is observed, with a proportionality factor $a_{\text{sw}} = 1.93$ MeV. It is very similar from what we obtain from our simplified model ($a_{\text{HO}} = 1.71$ MeV, top part of Fig. 5). The shell amplitude as a function of N is also well reproduced. Nevertheless, no supershell structure occurs in our analysis [17], and magic numbers are badly estimated because we are not taking into account, in our simple model, spin-orbit effects [3].

V. CONCLUSION

For a Fermi gas treated in the mean-field approximation, we provided here a quantitative description of the ground-state shell correction energy. Two different possibilities were considered: fixed potentials and self-bound systems. We showed that very different qualitative behaviors may appear in harmonic traps, depending on the number-theoretic properties of the frequency ratios. Based on a semiclassical theory, we provided analytic descriptions of the different behaviors as well as of the average of the shell energy. In spite of the model's simplicity, HO potentials show good qualitative agreement with more elaborate models. In self-bound systems, one of our main results is an accurate analytic description of the deformation and of the shell correction energy as a function of the particle number.

A few periodic orbits were used to describe $\tilde{E}(N)$. Although this is in general a good approximation, in some cases it fails. As discussed in Ref. [11] for $\tilde{\rho}$, the triaxial irrational case with frequencies very close to each other can reproduce, to a good approximation, the isotropic case, but only if a large number of terms in the sums is included. Generically, the convergence properties of the sums over periodic orbits is a delicate problem, directly related to the number-theoretic properties of the frequency ratios. We have not considered this problem in its full generality; it clearly deserves a closer inspection, in particular in connection with the minimization problem.

We have shown that, in self-bound systems, the properties of the shell correction energy scale as $-aN^{2/3}$ (or $-aN^{1/3}$, if saturation properties are taken into account), where a is some positive constant. Although it compares favorably with realistic nuclear models, it should be noted that this behavior is specific for HO potentials. In fact, if one considers instead a hard-wall spherical potential, supershell structures will appear, and modulations of, e.g., the average of $\bar{E}_{\text{SB}}(N)$ are expected, as observed in metallic clusters [18]. These, however, are not observed experimentally in nuclear data because of the limited number of nucleons (see, for instance, Ref. [17]). Deviations from an HO confining potential toward a more steeper one of the Woods-Saxon type are generically expected to be produced by interactions. Within a spherical symmetry, these deviations from an harmonic confinement were shown to lead to supershell effects [19].

ACKNOWLEDGMENTS

We thank Peter Schuck for useful discussions. This work was supported by grants ANR-05-Nano-008-02 and ANR-NT05-2-42103 from the IFRAF Institute.

-
- [1] R. B. Wiringa and S. C. Pieper, Phys. Rev. Lett. **89**, 182501 (2002); S. C. Pieper, K. Varga, and R. B. Wiringa, Phys. Rev. C **66**, 044310 (2002); S. Bargi, G. M. Kavoulakis, and S. M. Reimann, Phys. Rev. A **73**, 033613 (2006).
 - [2] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, Berlin, 1980).
 - [3] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, Vol. I (Benjamin, Reading, MA, 1969).
 - [4] M. Brack and R. K. Bhaduri, *Semiclassical Physics* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1997).
 - [5] M. Centelles, P. Leboeuf, A. G. Monastera, J. Rocca, P. Schuck, and X. Viñas, Phys. Rev. C **74**, 034332 (2006).
 - [6] K. M. O'Hara *et al.*, Science **298**, 2179 (2002).
 - [7] R. Grimm, M. Weidemüller, and Y. B. Ovchinnikov, Adv. At. Mol. Opt. Phys. **42**, 95 (2000); H. Heiselberg and B. Mottelson, Phys. Rev. Lett. **88**, 190401 (2002).
 - [8] P. M. Møller, J. R. Nix, W. D. Myers, and W. J. Swiatecki, At. Data Nucl. Data Tables **59**, 185 (1995).
 - [9] S. G. Nilsson, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. **29**, No. 16 (1955).
 - [10] A. Pandey, O. Bohigas, and M. J. Giannoni, J. Phys. A **22**, 4083 (1989).
 - [11] M. Brack and S. R. Jain, Phys. Rev. A **51**, 3462 (1995).
 - [12] P. Meier, M. Brack, and S. C. Creagh, Z. Phys. D **41**, 281 (1997).
 - [13] P. Leboeuf and A. G. Monastera, Ann. Phys. (NY) **297**, 127 (2002).
 - [14] H. Nishioka, K. Hansen, and B. R. Mottelson, Phys. Rev. B **42**, 9377 (1990).
 - [15] We may have chosen a rational frequency ratio between Q_1 and Q_3 instead of an irrational one. However, it can be shown that the isotropic term that appears for a rational ratio, discussed in Sec. III C, is not dominant at the middle of the shells, even in the limit $N \rightarrow \infty$, and that the analysis based on rational or irrational frequency ratios gives similar results, because of the N dependence of Q_1 .
 - [16] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (New York: Dover, 1972).
 - [17] P. Leboeuf, in *Lecture Notes in Physics*, vol. 652, edited by J. M. Arias and M. Lozano (Springer-Verlag, Berlin, 2005).
 - [18] W. D. Knight, K. Clemenger, W. A. de Heer, W. A. Saunders, M. Y. Chou, and M. L. Cohen, Phys. Rev. Lett. **52**, 2141 (1984).
 - [19] Y. Yu, M. Ogren, S. Aberg, S. M. Reimann, and M. Brack, Phys. Rev. A **72**, 051602(R) (2005).

Troisième partie

Densité de niveaux du problème à N-corps

Chapitre 5

Cadre général

La densité de niveaux est une quantité discrète qui pour un gaz de particules sans interactions est donnée par l'expression :

$$\rho_{MB}(E, N) = \sum_{\{n_j\}} \delta\left(E - \sum_{j=1}^{\infty} n_j \epsilon_j\right) \delta\left(N - \sum_{j=0}^{\infty} n_j\right). \quad (5.1)$$

C'est une quantité microcanonique où le nombre de particules N et l'énergie du système E sont fixés. ϵ_j correspond à l'énergie du niveau j du potentiel champ moyen à une particule et n_j est le nombre d'occupations du j -ème niveau à une particule pour une configuration $\{n_j\}$ donnée. Dans le cas de fermions, le principe d'exclusion de Pauli implique que n_j vaut soit 0 soit 1, pour des bosons n_j peut avoir n'importe quelle valeur entière positive. Dans le cas des bosons on choisit, sans perdre en généralité, $\epsilon_0 = 0$, E se confond alors avec l'énergie d'excitation Q . Pour les fermions, Q est défini comme la différence $E - E^0$, où E^0 est l'énergie du fondamental. Pour chaque configuration $\{n_j\}$ la conservation du nombre de particules implique $\sum_{j=1}^{\infty} n_j = N$ et

l'énergie du système est donnée par $\sum_{j=1}^{\infty} \epsilon_j n_j = E$.

La méthode standard pour évaluer ρ_{MB} est de prendre sa transformée de Laplace inverse :

$$\rho_{MB}(E, N) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} e^{\mathcal{S}(\beta, \mu)} d\beta d\mu, \quad (5.2)$$

où

$$\mathcal{S}(\beta, \mu) = \beta \left(-\Omega(\mu, \beta) + E - \mu N \right) \quad (5.3)$$

est l'entropie du système. La constante b (resp. c) est choisie de telle sorte qu'elle soit plus grande (resp. petite) que l'indice de sommabilité de $\exp[-\beta\Omega(\mu, \beta)]$ par rapport à la variable β (resp. μ).

Les deux paramètres μ et β correspondent respectivement au potentiel chimique et à l'inverse de la température. $\Omega(\mu, \beta)$ est le grand potentiel défini par :

$$\Omega(\mu, \beta) = \pm \frac{1}{\beta} \int_0^\infty \rho(\epsilon) \ln \left(1 \mp e^{\beta(\mu-\epsilon)} \right) d\epsilon . \quad (5.4)$$

Le signe du haut concerne des particules ayant la statistique de Bose-Einstein et le signe du bas concerne des particules ayant la statistique de Fermi-Dirac. La méthode du point de col par rapport aux variables μ et β donne un système d'équations :

$$\rho_{MB}(E, N) = \frac{e^{\mathcal{S}(\mu, \beta)}}{2\pi \sqrt{|\mathcal{D}(\mu, \beta)|}} , \quad (5.5)$$

$$N = \int_0^\infty \frac{\rho(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} \mp 1} , \quad (5.6)$$

$$E = \int_0^\infty \frac{\epsilon \rho(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} \mp 1} . \quad (5.7)$$

$\mathcal{D}(\mu, \beta)$ est un certain déterminant qui ne sera pas pertinent pour la suite de cette discussion. Les deux dernières équations fixent $\mu(N, E)$ et $\beta(N, E)$. On appellera fugacité le terme $e^{\beta\mu}$.

L'équation (5.6) nous donne pour les deux types de particules l'évolution du potentiel chimique en fonction de la température [43] : à température constante si on augmente le nombre de particules, le potentiel chimique doit alors croître. De plus, si ρ est une fonction non décroissante de ϵ et à température fixée, le potentiel chimique est une fonction décroissante de T . En effet si μ était constant, une augmentation de T se traduirait par une augmentation de l'intégrale. Pour empêcher cela (car N est fixe) il faut que μ décroisse. Le comportement du potentiel chimique est globalement schématisé par la figure 5.1. Ces équations déterminent le comportement du potentiel chimique pour les deux types de particules. Les résultats de cette section sont très généraux, dans la suite nous nous en servirons constamment pour calculer les différents comportements de ρ_{MB} .

Nous allons nous focaliser sur différents points de vue de l'équation fondamentale (5.1) de la densité de niveaux à N -corps :

les différents régimes de température, et les effets de taille finie seront abordés. De plus nous développerons aussi l'équation (5.1) pour l'appliquer à des modèles plus réalistes possédant plusieurs types de particules et un moment angulaire.

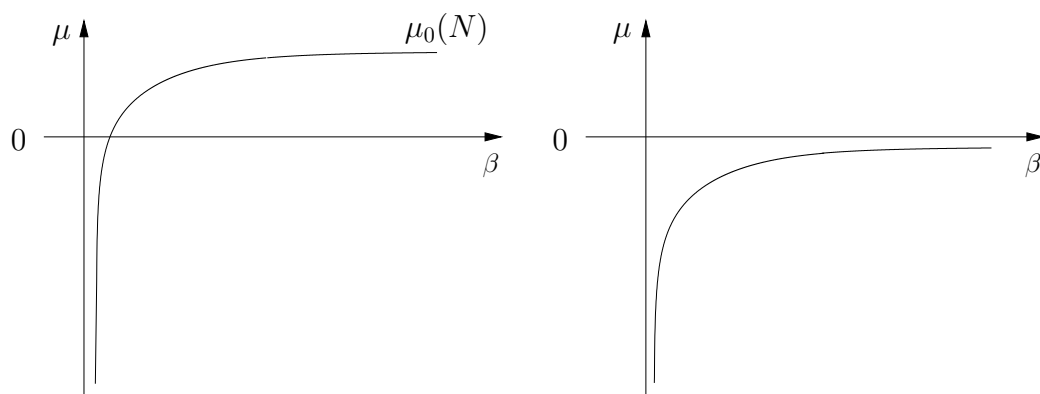


FIG. 5.1 – Evolution du potentiel chimique μ en fonction de l'inverse de la température β . A gauche pour les cas des fermions. A droite pour le cas des bosons. $\mu_0(N)$ désigne l'énergie de Fermi en fonction du nombre de particules N .

Chapitre 6

Equivalence bosons–fermions

Dans ce chapitre nous allons calculer exactement la densité de niveaux pour un système de particules sans interaction plongées dans un potentiel harmonique à une dimension de fréquence unité. Le spectre en énergie du système est donné par les demi-entiers.

Pour des bosons à température nulle, toutes les particules occupent le niveau fondamental $1/2$ (l'énergie est traitée ici de manière adimensionnée). On fait un changement d'origine de façon à placer le premier niveau à énergie nulle, le spectre du système est donc donné par l'ensemble des entiers. Connaître la densité de niveaux pour une énergie d'excitation n et pour un nombre de particules N revient à compter toutes les façons d'obtenir une énergie de n en excitant les particules. Pour fixer les idées prenons une énergie d'excitation de 4 unités : on peut donc soit exciter une particule de 4 unités, soit exciter une particule de 3 unités d'énergie et une de 1 unité, *etc.*. La dégénérescence est donc de 5 (voir figure 6.1). Une manière schématique de représenter ce dénombrement est d'utiliser les tableaux d'Young.

Un tableau d'Young est un tableau formé de n cases disposées en lignes de longueur non croissante : $c_1 \geq c_2 \geq \dots \geq c_N$, $\sum_{i=1}^N c_i = n$,

où c_i est le nombre de colonnes de la ligne i (cf. figure 6.1). Ainsi pour un entier n , le nombre de tableaux d'Young est égal au nombre de façons de décomposer n en somme d'entiers dont le nombre de termes de la somme ne dépasse pas N . Ce nombre $p(n)_N$ est appelé le nombre de partitions de n restreint à N termes.

Si maintenant on suppose, pour un tableau d'Young donné, que l'axe horizontal représente l'énergie d'excitation de la particule i et que l'axe vertical sépare les différentes particules, on remarque alors qu'on peut associer, de

manière bijective, à chaque configuration des particules, un tableau d'Young unique. Par conséquent, $p(n)_N$ est égal à $\rho_{MB}(n, N)$.

Considérons maintenant le pendant fermionique sans spin. On remplit les niveaux d'énergie avec des fermions jusqu'à l'énergie de Fermi. Là encore pour connaître $\rho_{MB}(n, N)$ il faut dénombrer toutes les façons d'obtenir une énergie de n en excitant les particules. On associe alors à chaque configuration un tableau d'Young où l'axe horizontal représente l'énergie d'excitation de la particule et l'axe vertical représente le niveau sur lequel se trouvait la particule avant excitation. Comme pour les bosons, on établit une bijection entre chaque configuration de particules et chaque tableau d'Young. Dans ce cas on obtient l'équivalence entre $\rho_{MB}(n, N)$ pour les fermions et $p(n)_N$. Et par conséquent avec $\rho_{MB}(n, N)$ pour des bosons. On peut aussi démontrer analytiquement ces relations d'équivalence *via* les fonctions de partition.

Deux remarques importantes peuvent être faites sur ces deux systèmes : Premièrement, dans le cas fermionique, l'énergie de Fermi dépend du nombre de particules alors que pour un système bosonique non. Cette différence fondamentale implique que l'équivalence entre les deux systèmes n'est possible que dans le cas de l'oscillateur harmonique à 1D.

Deuxièmement, lorsque le nombre de particules est supérieur ou égal à l'énergie d'excitation, $p(n)_N$ est égal au nombre de partition de n , $p(n)$. Le domaine général de la théorie des partitions a été abondamment étudiée par la communauté des mathématiciens [44]. On citera notamment les résultats de Hardy et Ramanujan qui ont donné une expression analytique de $p(n)$ [45] (voir l'annexe A). On donne la formule asymptotique de $p(n)$ lorsque N est très grand devant l'énergie d'excitation n :

$$p(n) = \frac{1}{\sqrt{48n}} e^{\sqrt{2\pi^2 n/3}} . \quad (6.1)$$

Celle-ci est équivalente à la formule de Bethe lorsque la densité moyenne de niveaux à une particule est constante égale à un au premier ordre en énergie. Le terme correctif à nombre fini de particules à $p(n)_N$ a été calculé par Erdős et Lehner [46], et vaut alors $e^{-e^{-x}}$ avec $x = \sqrt{\pi^2/(6n)}N + 1/2 \ln[\pi^2/(6n)]$. Ainsi lorsque l'énergie d'excitation augmente, le nombre de particules intervenant dans les configurations possibles s'accroît. Alors qu'on s'attend naturellement à voir augmenter le nombre de configurations lorsque l'on chauffe le système, le nombre fini de particules contribue à diminuer le nombre de configurations. Au chapitre 8 nous étudierons comment est modifié ce terme correctif lorsque la densité moyenne de niveaux à une particule suit une loi d'échelle.

Lorsque l'énergie d'excitation est très grande devant le nombre de particules,

la diminution du nombre de configuration est telle que $p(n)_N$ ne suit plus une loi exponentielle mais une loi d'échelle de la forme n^N (Erdős [44]).

tableau d'Young						
	particule	particule	particule	particule	particule	particule
système bosonique						
	état fondamental	4	3+1	2+2	2+1+1	1+1+1+1
tableau d'Young						
	no de la particule	no de la particule	no de la particule	no de la particule	no de la particule	no de la particule
système fermionique						
	état fondamental	4	3+1	2+2	2+1+1	1+1+1+1

FIG. 6.1 – Tableau du haut : Correspondance entre les configurations des bosons et les tableaux d'Young pour toutes les partitions de 4 avec 6 particules. Tableau du bas : Correspondance entre les configurations des fermions et les tableaux d'Young pour toutes les partitions de 4 avec 6 particules.

Chapitre 7

Partie lisse pour différents régimes de température

On s'intéresse au comportement moyen de ρ_{MB} pour les différents cas typiques de température pour des bosons ou des fermions. Ainsi toutes les grandeurs thermodynamiques comme l'entropie, la densité de niveaux seront lisses. Dans ce chapitre toutes les grandeurs sont adimensionnées.

Le terme dominant de ρ_{MB} étant toujours donné par la théorie de Thomas-Fermi, on se restreindra à une densité à une particule en loi de puissance (sauf pour le paragraphe § 7.2). On pose donc :

$$\rho(\epsilon) = \bar{\rho}(\epsilon) = \nu \epsilon^{\nu-1} \text{ où } \nu \in]0, +\infty[. \quad (7.1)$$

Par exemple le cas $\nu = 2$ correspond à l'ordre dominant de la partie lisse de la densité de niveaux à une particule pour un potentiel harmonique à trois dimensions. De la même manière, pour le cas des billards $\nu = d/2$ où d est la dimension de l'espace.

Le système d'équations (5.5), (5.6), (5.7) se réécrit comme suit :

$$\rho_{MB}(E, N) = \frac{e^S}{2\pi \sqrt{|\mathcal{D}(\beta, \mu)|}} , \quad (7.2)$$

$$N = \pm \frac{\Gamma(\nu + 1)}{\beta^\nu} Li_\nu(\pm e^{\beta\mu}) , \quad (7.3)$$

$$E = \pm \frac{\nu \Gamma(\nu + 1)}{\beta^{\nu+1}} Li_{\nu+1}(\pm e^{\beta\mu}) . \quad (7.4)$$

Où $Li_\nu(x) = \sum_{k=1}^{\infty} x^k/k^\nu$ désigne la fonction polylogarithme.

L'énergie du système et le grand potentiel sont alors reliés par $E = -\nu \Omega(\mu, \beta)$.

66 Chapitre 7. Partie lisse pour différents régimes de température

L'entropie se simplifie en

$$\mathcal{S} = \beta \left((1 + 1/\nu)E - \mu N \right). \quad (7.5)$$

7.1 Régime basse température pour les bosons

Dans le cas des bosons, à nombre de particules fixe, lorsque l'on diminue la température, l'équation (7.3) implique que $e^{\beta\mu}$ doit croître pour satisfaire l'égalité. Comme μ est toujours négatif (voir chapitre 5), $e^{\beta\mu}$ tend vers un. Le cas basse température correspond alors à μ tendant vers 0.

Or $Li_\nu(1) = \zeta(\nu)$ avec ζ la fonction zêta de Riemann. Le système d'équations (7.3) et (7.4) devient :

$$N = \frac{\Gamma(\nu + 1)\zeta(\nu)}{\beta^\nu}, \quad (7.6)$$

$$E = \frac{\nu\Gamma(\nu + 1)\zeta(\nu + 1)}{\beta^{\nu+1}}. \quad (7.7)$$

En combinant les équations précédentes on obtient l'équation d'état

$$\beta = (c_\nu/E)^{1/(1+\nu)} \quad (7.8)$$

et insérée dans (7.5) on arrive à

$$\mathcal{S} = (1 + 1/\nu)(c_\nu E^\nu)^{1/(\nu+1)}, \quad (7.9)$$

avec $c_\nu = \nu\Gamma(\nu + 1)\zeta(\nu + 1)$.

On voit que l'entropie d'un système bosonique est fonction seulement de l'énergie d'excitation et qu'elle dépend fortement du type de système considéré *via* le paramètre ν . Comme attendu on retrouve pour $\nu = 1$ le terme principal de $p(n)$ (voir l'équation (6.1)).

7.2 Régime basse température pour les fermions

Dans le cas des fermions, le nombre moyen d'occupation est donné par la fonction de Fermi-Dirac. A basse température on peut développer les expressions générales de N et E dans (5.6) et (5.7) en petit paramètre $1/(\beta\mu)$. Ce développement est appelé le développement de Sommerfeld [47], il est

valide pour toute fonction suffisamment régulière f (donc pas seulement polynomiale).

On a alors :

$$\int_0^\infty \frac{f(\epsilon)d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} = \int_0^\mu f(\epsilon)d\epsilon + 2 \sum_{n=1}^\infty \eta(2n)\beta^{-2n} \left. \frac{d^{2n-1}f(\epsilon)}{d\epsilon^{2n-1}} \right|_{\epsilon=\mu}, \quad (7.10)$$

où $\eta(x) = (1 - 2^{1-x})\zeta(x)$ est la fonction de Dirichlet.

A l'ordre dominant le système d'équations (5.6) et (5.7) donne alors :

$$N = \int_0^\mu \rho(\epsilon)d\epsilon, \quad (7.11)$$

$$E = \int_0^\mu \epsilon\rho(\epsilon)d\epsilon + 2\eta(2)\rho(\mu)\beta^{-2}. \quad (7.12)$$

On a négligé les termes où interviennent les dérivées de ρ . Dans ce cas, μ correspond à l'énergie de Fermi μ_0 et le premier terme du membre de droite de (7.12) correspond à l'énergie du fondamental E^0 . Lorsque ρ satisfait à (7.1), on peut facilement inverser l'équation (7.11) ce qui conduit à :

$$\mu_0 = N^{1/\nu} \quad (7.13)$$

L'équation (7.12) donne la relation entre l'énergie d'excitation et la température : $Q = E - E^0 = 2\eta(2)\rho(\mu)\beta^{-2}$.

On effectue une intégration par partie du grand potentiel (5.4) et on obtient après un développement de Sommerfeld

$$\Omega(\mu, \beta) = \Omega(\mu_0) - 2\eta(2)\rho(\mu_0)\beta^{-2}. \quad (7.14)$$

On utilise les développements (7.11), (7.12) et (7.14) dans l'expression de l'entropie (5.3), on a alors :

$$\mathcal{S}(\beta, \mu) = \beta \left(-\Omega(\mu_0) + 2\eta(2)\rho(\mu_0)\beta^{-2} + E - \mu N \right). \quad (7.15)$$

Ce qui donne à température nulle :

$$-\Omega(\mu_0) + E^0 - \mu_0 N = 0. \quad (7.16)$$

On utilise cette dernière équation dans (7.15) et cela mène finalement au terme dominant de l'entropie pour un gaz de Fermi à basse température :

$$\mathcal{S}(\beta, \mu) = 2\sqrt{\frac{\pi^2}{6}\rho(\mu_0)Q}, \quad (7.17)$$

68 Chapitre 7. Partie lisse pour différents régimes de température

où on a utilisé $\eta(2) = \pi^2/12$.

La dépendance en énergie de l'entropie ne dépend donc pas du type de système considéré. Seule la variation en N , par le biais de μ_0 , dépend du système. Le cas est donc bien différent de celui des bosons qui dépend seulement de l'énergie du système. On soulignera que pour $\nu = 1$ on retrouve bien l'équivalence bosons–fermions étudiée au chapitre 6 : comparaison entre les équations (7.17), (7.9) et (5.3) avec $\zeta(2) = \pi^2/6$.

7.3 Régime intermédiaire pour les fermions

D'après la figure 5.1, au fur et à mesure que la température augmente, le potentiel chimique diminue. On quitte alors le régime de validité de Sommerfeld ($T \ll \mu$). Un point intéressant est celui où le potentiel chimique s'annule et qui donne une valeur particulière T_c de température. Nous allons nous intéresser au comportement de ρ_{MB} dans ce cas.

Revenons à l'approximation (7.1). On pose alors $\mu = 0$ dans le système d'équations (7.3) et (7.4), on aboutit à :

$$N = -\frac{\Gamma(\nu + 1)}{\beta^\nu} Li_\nu(-1) = \frac{\Gamma(\nu + 1)}{\beta^\nu} \eta(\nu) , \quad (7.18)$$

$$E = -\frac{\nu\Gamma(\nu + 1)}{\beta^{\nu+1}} Li_{\nu+1}(-1) = \frac{\nu\Gamma(\nu + 1)}{\beta^{\nu+1}} \eta(\nu + 1) . \quad (7.19)$$

On en déduit $T_c = [\Gamma(\nu + 1)\eta(\nu)]^{-1/\nu} N^{1/\nu}$. Il est intéressant de comparer T_c à l'énergie de Fermi μ_0 du système. Une bonne estimation de celle-ci est donnée par (7.13) et donc $R = T_c/\mu_0 = [\Gamma(\nu + 1)\eta(\nu)]^{-1/\nu}$.

Une étude rapide de ce rapport en fonction de ν montre que R diverge pour $\nu \rightarrow 0$ et s'annule pour $\nu \rightarrow \infty$. Les cas des 3D HO ($\nu = 3$) et des billiards 3D ($\nu = 3/2$) donnent un rapport d'ordre un.

L'expression de l'entropie est donnée par les équations (7.5) et (7.19). On effectue le changement de variable $Q = E - E^0$, où $E^0 = \nu N^{(\nu+1)/\nu}/(\nu + 1)$. Cela mène à $\mathcal{S} \propto Q^{\nu/(\nu+1)}$.

Dans ce régime intermédiaire, on retrouve pour les fermions le même comportement de \mathcal{S} que pour des bosons à basse température (voir paragraphe §7.1) avec une dépendance en ν de l'énergie identique mais avec un facteur de proportionnalité différent. Ce résultat n'est pas surprenant car la fugacité à température nulle pour les bosons est la même que celle des fermions considérée dans ce paragraphe.

7.4 Régime haute température

Pour un nombre de particules fixé, lorsque la température du système est suffisamment grande, l'équation (5.6) impose que le potentiel chimique devienne négatif et grand en amplitude. $e^{\beta\mu}$ tend vers 0 et les différentes statistiques convergent vers la statistique de Maxwell-Boltzmann ($Li_\nu(x) \approx x$). Dans ce cas les équations (7.3) et (7.4) deviennent :

$$N = \frac{\Gamma(\nu + 1)}{\beta^\nu} e^{\beta\mu} , \quad (7.20)$$

$$E = \frac{\nu\Gamma(\nu + 1)}{\beta^{\nu+1}} e^{\beta\mu} . \quad (7.21)$$

On en déduit alors :

$$\rho_{MB}(E \rightarrow \infty, N) = \left[\frac{\Gamma(\nu + 1)E^\nu}{\nu^\nu N^{\nu+1}} \right]^N e^{(\nu+1)N} \text{ et } \mu = \ln(\beta^\nu N / \Gamma(\nu + 1)) / \beta . \quad (7.22)$$

On retrouve aussi l'équation d'état d'un gaz parfait : $E = \nu NT$. Ainsi on s'aperçoit qu'à la différence du comportement exponentiel à basse température de la densité de niveau, on a une croissance en loi d'échelle en fonction de l'énergie. A partir de l'équation (7.22) on retrouve bien l'ordre dominant du résultat de Sommermann et de Weidenmüller [8], qui trouve l'expression générale de la partie lisse de la densité de niveaux à partir de méthodes semiclassiques pour un système de particules en interaction dans la limite Maxwell-Boltzmann. Pour $\nu = 1$ on retrouve alors le résultat de Erdős pour $p(n)_N$ (voir chapitre 6).

Chapitre 8

Systeme à nombre fini de particules

Nous avons vu dans le chapitre 6 qu'il existe une relation étroite entre le système de particules sans interactions plongées dans un potentiel harmonique à une dimension et la théorie des partitions. Dans cette section nous allons nous aider des résultats de ce domaine des mathématiques pour étudier les corrections lisses à la densité de niveaux à N -corps lorsque le nombre de particules est fini et lorsque la température est basse. L'effet d'un nombre fini de particules à très haute température a déjà été traité au paragraphe §7.4. Pour ce faire nous utilisons l'approximation (7.1) qui ne prend en compte que la partie lisse de la densité de niveaux à une particule. Toutes les corrections trouvées seront donc lisses.

Les méthodes standards pour les systèmes bosoniques ou fermioniques que nous avons présentées au chapitre 7 considèrent implicitement que le système a un nombre de particules infini à basse température. Une façon d'évaluer ces corrections à nombre de particules fini consiste à développer en série de puissance de la fugacité les fonctions polylogarithmes des équations (7.3) et (7.4) dans la limite basse température.

8.1 Cas des bosons

Dans le cas des bosons, on a vu qu'à l'ordre dominant ρ_{MB} ne dépend pas du nombre de particules à basse température. Ainsi une quantité pertinente pour étudier les corrections de taille finie est la densité relative

$$F(Q, N) = \rho_{MB}(Q, N) / \rho_{MB}(Q, N = \infty) . \quad (8.1)$$

A basse température, le potentiel chimique du système est proche de la valeur $-1/(\beta N)$. Le terme de fugacité $e^{\beta\mu} = z$ tend donc vers 1. Pour résoudre le système d'équations (7.3) et (7.4), il faut connaître le développement de la fonction polylogarithme dans la limite $Li_\nu(z \rightarrow 1)$ [48]. $F(E, N)$ se comporte alors comme [49] :

$$\nu = 1 : F(E, N) = \exp(-\exp(-x)) , \quad (8.2)$$

$$0 < \nu < 1 : F(E, N) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ \exp[-x^{-\nu/(1-\nu)}] & x > 0 \end{cases} \quad (8.3)$$

$$\nu > 1 : F(E, N) = \begin{cases} \exp(-|x|^\gamma) & x \leq 0 \\ 1 & x > 0 , \end{cases} \quad (8.4)$$

où x et γ sont des fonctions de E et N . Ces trois distributions sont appelées respectivement Gumbel, Fréchet et Weibull. Elles représentent les trois distributions universelles de la théorie des valeurs extrêmes [50]. On peut montrer que la dérivée de $F(E, N)$ est reliée à la densité de probabilité du nombre de particules excitées. Ce résultat généralise entre autre le cas connu donné par Erdős et Lehner pour $p_N(n)$ lorsque $\nu = 1$ (voir chapitre 6 ou [46]) mais pour une partition d'un entier en somme d'entiers à la puissance ν [49].

8.2 Cas des fermions

Depuis les chapitres précédents on sait que, excepté dans le cas d'un spectre équidistant, les variations de ρ_{MB} pour des fermions sont très différentes du cas bosonique. Le potentiel chimique est grand par rapport à l'énergie d'excitation (voir figure 5.1) dans la limite gaz dégénéré. La fugacité du système à basse température tend vers l'infini. Pour résoudre le système d'équations (7.3) et (7.4), il faut cette fois-ci connaître le développement asymptotique de la fonction polylogarithme dans la limite $Li_\nu(-z \rightarrow -\infty)$. Garoni et al. [51] donne l'expression d'inversion de $Li_\nu(-z)$:

$$Li_\nu(-z) = -2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\eta(2n) \ln^{\nu-2n}(z^{-1})}{\Gamma(\nu+1-2n)} - \cos(\pi\nu) Li_\nu(-z^{-1}) , \quad (8.5)$$

On notera que pour des valeurs demi-entière de ν , le terme en $Li_\nu(-z^{-1})$ disparaît. De plus lorsque ν est entier la somme dans (8.5) s'arrête à la partie entière de $\nu/2$.

On remplace alors $Li_\nu(-z)$ par le terme de droite de l'équation (8.5) dans les équations (7.3) et (7.4). Comme z^{-1} tend vers zéro et que $Li_\nu(x) \underset{x \rightarrow 0}{\approx} x$,

cela conduit au système :

$$N = 2 \Gamma(\nu + 1) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\eta(2n) \beta^{-2n} \mu^{\nu-2n}}{\Gamma(\nu + 1 - 2n)} - \cos(\pi\nu) \frac{\Gamma(\nu + 1) e^{-\beta\mu}}{\beta^\nu}, \quad (8.6)$$

$$E = 2 \nu \Gamma(\nu + 1) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\eta(2n) \beta^{-2n} \mu^{\nu+1-2n}}{\Gamma(\nu + 2 - 2n)} + \cos(\pi\nu) \frac{\nu \Gamma(\nu + 1) e^{-\beta\mu}}{\beta^{\nu+1}}. \quad (8.7)$$

Les termes en loi de puissance en β et μ contenus dans la somme des équations (8.6) et (8.7) peuvent être retrouvés en utilisant le développement de Sommerfeld de $\rho(\epsilon)$ et de $\epsilon\rho(\epsilon)$ (voir paragraphe §7.2).

Prenons $\nu = 1$ pour comprendre ces résultats. Les équations (8.6) et (8.7) se réduisent à :

$$N = \mu + \frac{e^{-\beta\mu}}{\beta}, \quad (8.8)$$

$$E = Q + \frac{N^2}{2} = \frac{\mu^2}{2} + \frac{2\eta(2)}{\beta^2} - \frac{e^{-\beta\mu}}{\beta^2}. \quad (8.9)$$

Pour avoir l'expression de \mathcal{S} (et par conséquent de ρ_{MB}) en fonction de Q et N , on doit connaître μ et β en fonction de Q et N .

A l'ordre dominant on a $\mu = \mu_0 = N$ et $\beta = \beta_0 = \sqrt{2\eta(2)/Q}$.

En injectant ces valeurs dans l'équation (7.5) on obtient l'entropie :

$\mathcal{S} = 2 \sqrt{2\eta(2)Q}$, qui coïncide avec (7.17). L'expression de \mathcal{S} à l'ordre supérieur se fait à partir d'un développement perturbatif de μ et β dans (8.8) et (8.9). On aboutit à :

$$\mu = \mu_0 - \sqrt{\frac{Q}{2\eta(2)}} e^{-\sqrt{2\eta(2)/Q} N}, \quad (8.10)$$

$$\beta = \beta_0 - \frac{(N + \sqrt{\frac{Q}{2\eta(2)}})}{2Q} e^{-\sqrt{2\eta(2)/Q} N}. \quad (8.11)$$

En remplaçant ces expressions dans (7.5) on obtient finalement :

$$\mathcal{S} = 2\sqrt{2\eta(2)Q} - e^{-t}, \quad (8.12)$$

où $t = \sqrt{2\eta(2)/Q} N + \ln(\sqrt{2\eta(2)/Q})$. En divisant ρ_{MB} qui correspond à l'entropie (8.12) par l'expression (7.17) on obtient l'équivalent fermionique de (8.2) pour $\nu = 1$. La loi de Gumbel est bien retrouvée pour des fermions comme attendu de l'équivalence bosons-fermions (voir chapitre 6). On comprend alors que, bien que dépendants de N , les termes issus du développement

de Sommerfeld supposent que le nombre de particules excitées soit suffisamment faible pour considérer que les niveaux du bas du spectre soient toujours occupés. Le terme exponentiellement petit $e^{-\beta\mu}$, absent du développement de Sommerfeld, permet justement d'évaluer les corrections de ρ_{MB} dues à la partie basse du spectre. Nous les appelons les contributions non locales.

Pour ν quelconque, les termes dominants de l'entropie seront donnés par le développement perturbatif de la série de Sommerfeld. Pour évaluer la correction dominante non locale, on effectue un développement limité comme dans le cas $\nu = 1$ en n'utilisant que les termes dominants du développement de Sommerfeld. Le cas général fermionique est alors donné par :

$$F(Q, N) = \frac{\rho_{MB}(Q, N)}{\rho_{MB}(Q, N)_{Sommerfeld}} = \exp\left(\frac{\cos(\pi\nu)\Gamma(\nu+1)}{\beta_0^\nu} \exp(-\beta_0\mu_0)\right), \forall \nu > 0. \quad (8.13)$$

Avec

$$\mu_0 = N^{1/\nu} \text{ et } \beta_0 = \nu\sqrt{2\eta(2)/Q}N^{(\nu-1)/2\nu}. \quad (8.14)$$

$\rho_{MB}(Q, N)_{Sommerfeld}$ dénote la densité de niveaux calculée à partir du développement de Sommerfeld seulement.

La distribution trouvée peut être considérée comme une loi de Gumbel qui serait déformée. Il n'y a pas une exhaustivité des distributions par rapport aux lois des extrêmes comme dans le cas bosonique. Le fait que la fonction s'annule pour certaines valeurs de ν ou même devienne positive semble compromettre la compréhension heuristique du terme non local de la densité de niveaux. Il n'est pas du tout clair que dans le cas $\nu \neq 1$, le terme non local soit relié à la distribution du nombre de particules excitées en fonction de l'énergie d'excitation. En effet on pourrait penser que ce n'est qu'une correction non physique au développement de Sommerfeld. Cependant la formule (8.14) n'est correcte que pour une densité à une particule de la forme (7.1). Or pour un vrai système physique on peut penser que la densité de niveaux à petite échelle d'énergie se comporte plutôt de manière linéaire. Si $\nu > 1$, une légère contribution linéaire (*i.e.* $\nu = 0$) à ρ donne un terme non local dominant dans (8.13) et on obtient un comportement de type Gumbel pour $F(Q, N)$.

On peut donc supposer que le cas fermionique est moins riche que le cas bosonique. Ceci est certainement relié au fait aussi qu'il n'y a pas de phénomène de transition de phase dans les fermions.

Chapitre 9

Systeme réaliste, régime basse température

Les travaux pionniers de Bethe en 1936 [1] sur la densité de niveaux ont permis de décrire dans les grandes lignes le comportement de la densité de niveaux en physique nucléaire. Le succès de ce modèle provient du fait que les données expérimentales sont assez bien reproduites alors que les approximations sont plutôt grossières. En effet les interactions entre particules sont prises en compte seulement à travers le champ moyen. On s'intéresse au cas où le système a une énergie E , et est composé de 2 types de fermion (N et Z) avec un moment angulaire J et avec dégénérescence de spin.

Mais pour commencer nous étudierons le cas d'un système avec un moment angulaire M selon l'axe Oz .

La densité de niveaux s'écrit comme :

$$\rho_{MB}(N, Z, M, E) = \sum_{i, n_N, n_Z} \delta(N - n_Z) \delta(Z - n_Z) \delta(E - E_i) \delta(M - M_i) . \quad (9.1)$$

Avec :

$$E_i(n_N, n_Z) = \sum_j (n_N(j))_i \epsilon_N(j) + \sum_j (n_Z(j))_i \epsilon_Z(j) , \quad (9.2)$$

$$M_i(n_N, n_Z) = \sum_j (n_N(j))_i m_N(j) + \sum_j (n_Z(j))_i m_Z(j) , \quad (9.3)$$

$$n_N = \sum_j (n_N(j))_i , \quad (9.4)$$

$$n_Z = \sum_j (n_Z(j))_i . \quad (9.5)$$

Où $n_k(j)$ est le nombre d'occupations du niveau à une particule j pour le type de fermion k . $\epsilon_k(j)$ (resp. $m_k(j)$) désigne l'énergie (resp. le moment angulaire selon l'axe Oz) du niveau à une particule j . i est l'indice de configuration des particules pour une énergie et un moment angulaire donnés. On prend ensuite la transformée de Laplace de ρ_{MB} :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\alpha_N, \alpha_Z, \beta, \gamma) &= \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \rho_{MB}(N, Z, M, E) \exp(\alpha_N N + \alpha_Z Z - \beta E - \gamma M) dN dZ dE dM \\ &= \sum_{i, n_N, n_Z} \exp \left[\alpha_N \sum_j (n_N(j))_i + \alpha_Z \sum_j (n_Z(j))_i - \beta \sum_j \left((n_N(j))_i \epsilon_N(j) + (n_Z(j))_i \epsilon_Z(j) \right) \right. \\ &\quad \left. - \gamma \sum_j \left((n_N(j))_i m_N(j) + (n_Z(j))_i m_Z(j) \right) \right] \end{aligned} \quad (9.6)$$

Comme n_N et n_Z prennent les valeurs 0 ou 1, l'équation (9.6) s'écrit comme :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\alpha_N, \alpha_Z, \beta, \gamma) &= \prod_j \left[1 + e^{\alpha_N - \beta \epsilon_N(j) - \gamma m_N(j)} + e^{\alpha_Z - \beta \epsilon_Z(j) - \gamma m_Z(j)} \right. \\ &\quad \left. + e^{(\alpha_N + \alpha_Z) - \beta (\epsilon_N(j) + \epsilon_Z(j)) - \gamma (m_N(j) + m_Z(j))} \right] \\ &= \prod_j \left(1 + e^{\alpha_N - \beta \epsilon_N(j) - \gamma m_N(j)} \right) \left(1 + e^{\alpha_Z - \beta \epsilon_Z(j) - \gamma m_Z(j)} \right). \end{aligned} \quad (9.7)$$

D'où :

$$\ln \mathcal{Z}(\alpha_N, \alpha_Z, \beta, \gamma) = \sum_j \ln \left(1 + e^{\alpha_N - \beta \epsilon_N(j) - \gamma m_N(j)} \right) + \sum_j \ln \left(1 + e^{\alpha_Z - \beta \epsilon_Z(j) - \gamma m_Z(j)} \right) \quad (9.8)$$

$$= \ln \mathcal{Z}_N(\alpha_N, \beta, \gamma) + \ln \mathcal{Z}_Z(\alpha_Z, \beta, \gamma). \quad (9.9)$$

Focalisons-nous sur un type de fermion.

On a alors :

$$\ln \mathcal{Z}(\alpha_k, \beta, \gamma) = \sum_\lambda \int \rho_\lambda(\epsilon) \ln(1 + e^{\alpha_k - \beta \epsilon - \gamma m_{k,\lambda}}) d\epsilon. \quad (9.10)$$

Où $\rho_{k,\lambda}$ est la densité de niveaux à une particule pour le type de fermion k et pour un moment angulaire $m_{k,\lambda}$. λ est l'indice correspondant au moment angulaire $m_{k,\lambda}$.

En utilisant la transformée de Laplace inverse on obtient (pour les bornes d'intégration se référer au chapitre 5) :

$$\rho_{MB}(N, Z, E, M) = \frac{1}{(2\pi i)^4} \int \int \int \int \exp \left(\ln \mathcal{Z}_N + \ln \mathcal{Z}_Z - \alpha_N N - \alpha_Z Z + \beta E + \gamma M \right) d\alpha_N d\alpha_Z d\beta d\gamma. \quad (9.11)$$

La méthode du point de col appliquée à (9.11) donne les conditions suivantes :

$$\frac{\partial \ln \mathcal{Z}_N}{\partial \alpha_N} - N = 0 , \quad (9.12)$$

$$\frac{\partial \ln \mathcal{Z}_Z}{\partial \alpha_Z} - Z = 0 , \quad (9.13)$$

$$\frac{\partial (\ln \mathcal{Z}_N + \ln \mathcal{Z}_Z)}{\partial \beta} + E = 0 , \quad (9.14)$$

$$\frac{\partial (\ln \mathcal{Z}_N + \ln \mathcal{Z}_Z)}{\partial \gamma} + M = 0 . \quad (9.15)$$

Ce qui mène à :

$$\sum_{\lambda} \int \rho_{N,\lambda}(\epsilon) f_{\lambda}(\epsilon, \beta, \alpha_N, \gamma) d\epsilon = \sum_{\lambda} \mathcal{N}_{\lambda}(\alpha_N, \beta, \gamma) = N , \quad (9.16)$$

$$\sum_{\lambda} \int \rho_{Z,\lambda}(\epsilon) f_{\lambda}(\epsilon, \beta, \alpha_Z, \gamma) d\epsilon = \sum_{\lambda} \mathcal{N}_{\lambda}(\alpha_Z, \beta, \gamma) = Z , \quad (9.17)$$

$$\sum_{k,\lambda} \int \epsilon \rho_{k,\lambda}(\epsilon) f_{\lambda}(\epsilon, \beta, \alpha_k, \gamma) d\epsilon = \sum_{k,\lambda} \mathcal{E}_{\lambda}(\alpha_k, \beta, \gamma) = E , \quad (9.18)$$

$$\sum_{k,\lambda} m_{\lambda} \int \rho_{k,\lambda}(\epsilon) f_{\lambda}(\epsilon, \beta, \alpha_k, \gamma) d\epsilon = M , \quad (9.19)$$

Avec :

$$f_{\lambda}(\epsilon, \beta, \alpha_k, \gamma) = \frac{1}{e^{-\alpha_k + \beta\epsilon + \gamma m_{k,\lambda}} + 1} . \quad (9.20)$$

Les énergies de Fermi sont données par :

$$\epsilon_{k,\lambda} = \mu_k + \xi m_{k,\lambda} . \quad (9.21)$$

où $\mu_k = \alpha_k/\beta$ est le potentiel chimique du type de fermion k et $\xi = \gamma/\beta$.

L'entropie du système s'écrit comme :

$$\mathcal{S} = -\beta \sum_{\lambda,k} \Omega_{\lambda}(\alpha_k, \beta, \gamma) - \mu_N N - \mu_Z Z + \beta E + \gamma M . \quad (9.22)$$

Avec

$$\Omega_{\lambda}(\alpha_k, \beta, \gamma) = \frac{-1}{\beta} \int \rho_{k,\lambda}(\epsilon) \ln(1 + e^{\alpha_k - \beta\epsilon - \gamma m_{k,\lambda}}) d\epsilon . \quad (9.23)$$

Tout au long de ce chapitre nous passerons régulièrement des variables $(\alpha_k, \beta, \gamma)$ aux variables (μ_k, T, ξ) sans modifier les définitions des fonctions dans lesquelles ces variables interviennent afin d'éviter un nombre trop important de

fonctions. Nous espérons que cela ne nuira pas à la compréhension du texte. La densité de niveaux s'écrit alors comme :

$$\rho_{MB}(N, Z, E, M) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{e^S}{\sqrt{\mathcal{D}}} \quad (9.24)$$

où

$$\mathcal{D} = \det \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 \ln \mathcal{Z}}{\partial \alpha_N^2} & \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \alpha_N \partial \alpha_Z} & \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \alpha_N \partial \beta} & \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \alpha_N \partial \gamma} \\ \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \alpha_Z \partial \alpha_N} & \frac{\partial^2 \ln \mathcal{Z}}{\partial \alpha_Z^2} & \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \alpha_Z \partial \beta} & \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \alpha_Z \partial \gamma} \\ \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta \partial \alpha_N} & \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta \partial \alpha_Z} & \frac{\partial^2 \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta^2} & \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta \partial \gamma} \\ \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \gamma \partial \alpha_N} & \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \gamma \partial \alpha_Z} & \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \gamma \partial \beta} & \frac{\partial^2 \ln \mathcal{Z}}{\partial \gamma^2} \end{vmatrix}. \quad (9.25)$$

9.1 Partie lisse

Dans ce paragraphe, on considère que la densité de niveaux à une particule $\rho_{k,\lambda}$ est donnée par la théorie de Thomas-Fermi ($\rho_{k,\lambda} \Rightarrow \bar{\rho}_{k,\lambda}$). Son comportement est donc lisse. Comme $\bar{\rho}_{k,\lambda}$ permet de calculer toutes les grandeurs thermodynamiques étudiées, elle décrira donc le comportement moyen de la densité de niveaux. Les variables seront surlignées d'un trait pour indiquer que c'est leur partie moyenne qui est exprimée.

L'énergie d'excitation Q du système est la variable naturelle dans ce type de régime. Nous allons donc exprimer la densité de niveaux en fonction de celle-ci.

$\bar{\Omega}_\lambda$ étant une fonction lisse, on peut effectuer un développement de Sommerfeld pour $\bar{\mu}_k \gg 1/\bar{\beta}$ [47] :

$$\bar{\Omega}_\lambda(\bar{\alpha}_k, \bar{\beta}, \bar{\gamma}) = \bar{\Omega}_\lambda(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}^1) - \frac{\pi^2}{6} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}^1) \bar{T}^2. \quad (9.26)$$

$\bar{\epsilon}_{k,\lambda}^1$ est l'énergie de Fermi à température nulle. Néanmoins cette température est reliée à Q^1 , l'énergie d'excitation par rapport au niveau le plus bas en énergie sans minimisation de M . Or nous nous intéressons à l'énergie d'excitation Q définie par rapport au niveau fondamental. Nous allons donc par la suite exprimer Q^1 en fonction de Q .

L'équation (9.22) s'écrit :

$$\bar{T} \bar{\mathcal{S}} = - \sum_{k,\lambda} \left(\bar{\Omega}_\lambda(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}^1) + \frac{\pi^2}{6} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}^1) \bar{T}^2 \right) + E - \bar{\mu}_N N - \bar{\mu}_Z Z + \bar{\xi} M. \quad (9.27)$$

A $\bar{T} = 0$ on a :

$$0 = - \sum_{k,\lambda} \bar{\Omega}_\lambda(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}^1) + E^1 - \bar{\mu}_N N - \bar{\mu}_Z Z + \bar{\xi} M. \quad (9.28)$$

E^1 est l'énergie de l'état de plus bas ayant comme paramètre M . On soustrait cette dernière équation à (9.27) :

$$\bar{T}\bar{\mathcal{S}} = \frac{\pi^2}{6} \sum_{k,\lambda} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}^1) \bar{T}^2 + E - E^1 . \quad (9.29)$$

En utilisant un développement de Sommerfeld sur l'équation (9.18) on obtient :

$$\sum_k \bar{\mathcal{E}}_\lambda(\bar{\alpha}_k, \bar{\beta}, \bar{\gamma}) = \bar{\mathcal{E}}(\bar{\epsilon}_{N,\lambda}^1) + \bar{\mathcal{E}}(\bar{\epsilon}_{Z,\lambda}^1) + \frac{\pi^2}{6} \sum_{k,\lambda} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}^1) \bar{T}^2 . \quad (9.30)$$

Avec par définition :

$$\sum_{k,\lambda} \bar{\mathcal{E}}_\lambda(\bar{\alpha}_k, \bar{\beta}, \bar{\gamma}) = E \text{ et } \sum_{k,\lambda} \bar{\mathcal{E}}(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}^1) = E^1 . \quad (9.31)$$

On obtient alors :

$$\bar{\mathcal{S}} = 2 \sqrt{\frac{\pi^2}{6} \sum_{k,\lambda} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}^1) Q^1} . \quad (9.32)$$

Avec $Q^1 = E - E^1$. Mais la grandeur qui nous intéresse est $Q = E - E^0$ avec E^0 pour énergie du fondamental du système qui n'est pas *a priori* E^1 . Pour trouver le vrai niveau fondamental il faut donc minimiser l'énergie E^1 dans l'espace des M .

On a donc :

$$0 = \delta \sum_{k,\lambda} \bar{\mathcal{E}}(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}^1) \quad (9.33)$$

$$0 = \sum_{k,\lambda} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}) \bar{\epsilon}_{k,\lambda} m_{k,\lambda} \delta \bar{\xi} \quad (9.34)$$

$$0 = \left(\sum_{k,\lambda} m_{k,\lambda} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}) \bar{\mu}_k + \sum_{k,\lambda} m_{k,\lambda}^2 \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}) \right) \delta \bar{\xi} \quad (9.35)$$

On suppose que $\bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\epsilon}_{k,\lambda})$ est similaire pour n'importe quelle λ et que $m_{k,\lambda}$ est symétrique dans les signes on a alors :

$$\sum_{k,\lambda} m_{k,\lambda} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\epsilon}_{k,\lambda}) = 0 \quad (9.36)$$

La condition précédente insérée dans (9.35) implique $\bar{\xi} = 0$. Ainsi l'énergie de Fermi à température nulle vaut $\bar{\mu}_N + \bar{\mu}_Z$ et $E^0 = \bar{\mathcal{E}}(\bar{\mu}_N) + \bar{\mathcal{E}}(\bar{\mu}_Z)$. En utilisant cette dernière condition dans (9.19) on obtient :

$$M = \bar{\xi} \sum_{k,\lambda} m_{k,\lambda}^2 \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k) = \sum_k \bar{\rho}_k(\bar{\mu}_k) \langle m^2 \rangle \bar{\xi} , \quad (9.37)$$

avec $\langle m^2 \rangle = \sum_{k,\lambda} m_{k,\lambda}^2 \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k) / \sum_{k,\lambda} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k)$.

La différence entre E^1 et E^0 est :

$$E^1 - \left(\bar{\mathcal{E}}(\bar{\mu}_N) + \bar{\mathcal{E}}(\bar{\mu}_Z) \right) = \sum_{k,\lambda} m_{k,\lambda} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k) \bar{\xi} + \frac{1}{2} \sum_{k,\lambda,\lambda'} m_{k,\lambda} m_{k,\lambda'} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k) \bar{\xi}^2. \quad (9.38)$$

Le premier terme de droite s'annule (cf. (9.36)), de même que les termes croisés dans la dernière somme. On utilise l'équation (9.37), cela mène à :

$$E^1 - E^0 = \frac{M^2}{2 \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) \langle m^2 \rangle}. \quad (9.39)$$

Or $Q^1 = E - E^1 = Q - (E^1 - E^0)$, d'après (9.32) on a donc pour l'entropie du système :

$$\bar{\mathcal{S}} = 2 \sqrt{\frac{\pi^2}{6} \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) \left[Q - \frac{M^2}{2 \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) \langle m^2 \rangle} \right]} \quad (9.40)$$

Si $E^1 - E^0$ est petit, l'équation se ramène à :

$$\bar{\mathcal{S}} = 2 \sqrt{\frac{\pi^2}{6} \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) Q} - \frac{M^2}{2\sigma^2}. \quad (9.41)$$

Avec $\sigma^2 = \sqrt{6 \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) Q \langle m^2 \rangle} / \pi$.

En effectuant le développement de Sommerferld de la partie gauche de l'équation (9.18) on obtient la relation entre l'énergie d'excitation et la température :

$$\bar{T} = \sqrt{\frac{6Q^1}{\pi^2 \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right)}} = \sqrt{\frac{6 \left[Q - \frac{M^2}{2 \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) \langle m^2 \rangle} \right]}{\pi^2 \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right)}}. \quad (9.42)$$

Contrairement aux chapitres précédant nous incluons dans ce calcul les termes sous-dominants qui proviennent du déterminant \mathcal{D} . On utilise alors les équations (9.19), (9.38) et (9.36) pour simplifier \mathcal{D} , on aboutit à :

$$\mathcal{D} = \frac{\pi^2}{3} \bar{T}^6 \langle m^2 \rangle \bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right)^2 \quad (9.43)$$

$$= \frac{3 \cdot 6^2}{\pi^4} \left(Q - \frac{1}{2 \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) \langle m^2 \rangle} \frac{M^2}{\langle m^2 \rangle} \right)^3 \langle m^2 \rangle \bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z). \quad (9.44)$$

A l'ordre dominant en Q et en remplaçant l'expression de $\langle m^2 \rangle$ par σ , on obtient :

$$\begin{aligned} \rho_{MB}(N, Z, Q, M) &= \frac{\left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z)\right)^{3/4}}{8\sqrt{3} \cdot 6^{1/4} \sqrt{\pi} \sigma Q^{5/4} \sqrt{\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z)}} \\ &\times \exp\left(\sqrt{\frac{2\pi^2}{3}} \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z)\right) Q - \frac{M^2}{2\sigma^2}\right). \end{aligned} \quad (9.45)$$

La densité de niveaux pour un moment angulaire total J est obtenue à partir de la dérivée de ρ_{MB} . De plus on considère que pour les deux types de fermion la densité de niveaux à une particule est identique, $\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) = \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) = \bar{\rho}/2$. On obtient alors l'expression

$$\rho_{MB}(N, Z, Q, J) = \rho_{MB}(N, Z, Q, M = J) - \rho_{MB}(N, Z, Q, M = J + 1) \quad (9.46)$$

$$\approx - \left. \frac{\partial \rho_{MB}(N, Z, Q, M)}{\partial M} \right|_{M=J+1/2} \quad (9.47)$$

$$\approx \frac{2J+1}{2\sqrt{2\pi}\sigma^3} e^{-\frac{(J+1/2)^2}{2\sigma^2}} \frac{6^{1/4}}{12\bar{\rho}^{1/4}Q^{5/4}} e^{2\sqrt{\frac{\pi^2}{6}}\bar{\rho}Q}. \quad (9.48)$$

De récents travaux, à partir de la méthode du point de col, ont permis d'obtenir des termes correctifs de $\bar{\mathcal{S}}$ pour un potentiel harmonique à un dimension et pour deux types de particules [53]. Néanmoins il n'existe pas pour l'instant de théories générales permettant d'évaluer ces termes pour un type quelconque de potentiel. Ainsi au vu des relations étroites entre ρ_{MB} et le nombre de partitions $p(n)$ (cf. les chapitres 6 et 8 et [52]), il a été conjecturé que les termes sous-dominants de $\bar{\mathcal{S}}$ sont donnés par le développement

limité de $2^{1/4}p_2(K = \bar{\rho}Q/2)$ avec $p_2(K) = \sum_{i=0}^K p(i)p(K-i)$ [5]. Dans ce cas

on obtient les équations (2) et (3) de l'article [5]. On signale que le dernier terme de droite dans l'équation (4) de l'article [5] est faux, nous donnons son expression correcte ci-dessous :

$$\rho_{MB}(N, Z, Q, J) = \frac{2J+1}{2\sqrt{2\pi}\sigma^3} e^{-\frac{(J+1/2)^2}{2\sigma^2}} \rho_{MB}(N, Z, Q), \quad (9.49)$$

avec

$$\rho_{MB}(N, Z, Q)/\bar{\rho} = \frac{6^{1/4}}{12(\bar{\rho}Q)^{5/4}} e^{\bar{\mathcal{S}}_{eq}} \quad (9.50)$$

$$\text{et } \bar{\mathcal{S}}_{eq} = 2\sqrt{\frac{\pi^2}{6}\bar{\rho}Q} - \left(\frac{\pi}{36} + \frac{15}{16\pi}\right) \frac{\sqrt{6}}{\sqrt{\bar{\rho}Q}} - \left(\frac{45}{32\pi^2} - \frac{5}{24}\right) \frac{1}{\bar{\rho}Q} + \mathcal{O}((\bar{\rho}Q)^{-3/2}). \quad (9.51)$$

L'annexe A donne la méthode pour calculer $\bar{\mathcal{S}}_{eq}$.

9.2 Partie oscillante

En première partie de la thèse nous avons étudié les propriétés de la densité de niveaux à une particule. Nous avons constaté qu'en plus d'un comportement régulier en fonction de l'énergie, il existe une théorie pour calculer la contribution oscillante. Nous allons maintenant calculer l'équivalent de cette contribution mais pour un système de particules en interactions. Pour cela nous devons évaluer la partie oscillante de l'entropie du système. En effet bien qu'en toute rigueur nous devrions aussi évaluer la partie oscillante de \mathcal{D} , sa contribution à la densité de niveaux n'est que polynomiale alors que celle de l'entropie est exponentielle dans la limite basse température. Elle est donc négligeable.

On tient maintenant compte de la partie fluctuante la densité de niveaux à une particule, on rappelle que celle-ci peut s'écrire :

$$\rho = \bar{\rho} + \tilde{\rho} . \quad (9.52)$$

Dans ce cas toutes les grandeurs thermodynamiques (énergie, moment angulaire, *etc.*) vont posséder une partie lisse notée par " \bar{X} " et une partie oscillante notée " \tilde{X} ".

Le développement de Taylor de $\bar{\Omega}_\lambda(\mu_k, T, \xi)$ donne :

$$\bar{\Omega}_\lambda(\mu_k, T, \xi) = \bar{\Omega}_\lambda(\bar{\mu}_k, \bar{T}, \bar{\xi}) + \frac{\partial \bar{\Omega}_\lambda}{\partial \bar{\mu}_k} \tilde{\mu} + \frac{\partial \bar{\Omega}_\lambda}{\partial \bar{T}} \tilde{T} + \frac{\partial \bar{\Omega}_\lambda}{\partial \bar{\xi}} \tilde{\xi} . \quad (9.53)$$

D'après les équations (9.23), (9.16) et (9.17) on a :

$$\frac{\partial \bar{\Omega}_\lambda}{\partial \bar{\mu}_k} = -\bar{\mathcal{N}}_\lambda(\bar{\mu}_k, \bar{T}, \bar{\xi}) , \quad (9.54)$$

$$\frac{\partial \bar{\Omega}_\lambda}{\partial \bar{T}} = -\sum_k \bar{\mathcal{S}}_\lambda(\bar{\mu}_k, \bar{T}, \bar{\xi}) , \quad (9.55)$$

$$\frac{\partial \bar{\Omega}_\lambda}{\partial \bar{\xi}} = \sum_k m_{k,\lambda} \bar{\mathcal{N}}_\lambda(\bar{\mu}_k, \bar{T}, \bar{\xi}) . \quad (9.56)$$

Ainsi l'équation (9.22) s'écrit :

$$\begin{aligned} (\bar{T} + \tilde{T})\mathcal{S} = & - \sum_{k,\lambda} \bar{\Omega}_\lambda(\bar{\mu}_k, \bar{T}, \bar{\xi}) - \sum_{k,\lambda} \tilde{\Omega}_\lambda(\mu_k, T, \xi) \\ & + \sum_{k,\lambda} \bar{\mathcal{N}}_\lambda(\bar{\mu}_k, \bar{T}, \bar{\xi}) \tilde{\mu}_k - \sum_{k,\lambda} m_{k,\lambda} \bar{\mathcal{N}}_\lambda(\bar{\mu}_k, \bar{T}, \bar{\xi}) \tilde{\xi} + \sum_{k,\lambda} \bar{\mathcal{S}}_\lambda(\bar{\mu}_k, \bar{T}, \bar{\xi}) \tilde{T} \\ & + E - \bar{\mu}_N N - \tilde{\mu}_N N - \bar{\mu}_Z Z - \tilde{\mu}_Z Z + \bar{\xi} M + \tilde{\xi} M . \end{aligned} \quad (9.57)$$

Les conditions (9.16), (9.17), (9.18), (9.19) sont aussi valables pour la partie lisse de \mathcal{Z} , en utilisant le développement de Sommerfeld pour $\bar{\Omega}_\lambda(\bar{\mu}_k, \bar{T}, \bar{\xi})$, l'expression (9.57) se simplifie en :

$$\begin{aligned} \bar{T}\mathcal{S} = & - \sum_{k,\lambda} \bar{\Omega}_\lambda(\bar{\mu}_k, 0, \bar{\xi}) + \frac{\pi^2}{6} \sum_{k,\lambda} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k) \bar{T}^2 \\ & - \sum_{k,\lambda} \tilde{\Omega}_\lambda(\mu_k, T, \xi) + E - \bar{\mu}_N N - \bar{\mu}_Z Z + \bar{\xi} M . \end{aligned} \quad (9.58)$$

A $T = 0$, on a :

$$0 = - \sum_{k,\lambda} \bar{\Omega}_\lambda(\bar{\mu}_k, 0, \bar{\xi}) - \sum_{k,\lambda} \tilde{\Omega}_\lambda(\mu_k, 0, \xi) + E^1 - \bar{\mu}_N N - \bar{\mu}_Z Z + \bar{\xi} M . \quad (9.59)$$

On insère l'équation précédente dans (9.58) et on obtient :

$$\bar{T}\mathcal{S} = Q^1 + \frac{\pi^2}{6} \sum_{k,\lambda} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k) \bar{T}^2 + \sum_{k,\lambda} \left(\tilde{\Omega}_\lambda(\mu_k, 0, \xi) - \tilde{\Omega}_\lambda(\mu_k, T, \xi) \right) . \quad (9.60)$$

A l'ordre dominant en $\bar{\mathcal{E}}$, l'expression (9.18) se réduit à (9.42) :

$$Q^1 = \frac{\pi^2}{6} \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) \bar{T}^2, \quad (9.61)$$

on obtient alors l'expression de l'entropie en fonction de l'énergie d'excitation par rapport au niveau fondamental sans minimisation de M :

$$\mathcal{S} = 2 \sqrt{\frac{\pi^2}{6} \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right)} Q^1 + \frac{1}{\bar{T}} \sum_{k,\lambda} \left(\tilde{\Omega}_\lambda(\mu_k, 0, \xi) - \tilde{\Omega}_\lambda(\mu_k, T, \xi) \right) . \quad (9.62)$$

De plus les fluctuations du grand potentiel peuvent être remplacées à l'ordre le plus bas par celles de l'énergie [54, 55]. On obtient donc :

$$\mathcal{S} = 2 \sqrt{\frac{\pi^2}{6} \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right)} Q^1 + \frac{1}{\bar{T}} \sum_{k,\lambda} \left(\tilde{\mathcal{E}}_\lambda(\mu_k, 0, \xi) - \tilde{\mathcal{E}}_\lambda(\mu_k, T, \xi) \right) . \quad (9.63)$$

Comme dans le paragraphe précédent, on doit maintenant exprimer Q^1 en fonction de Q , on a donc

$$E^1 = \sum_{k,\lambda} \left(\bar{\mathcal{E}}(\bar{\mu}_k + \tilde{\mu}_k + \bar{\xi} m_{k,\lambda} + \tilde{\xi} m_{k,\lambda}) + \tilde{\mathcal{E}}_\lambda(\mu_k, 0, \xi) \right) \quad (9.64)$$

$$= \bar{\mathcal{E}}(\bar{\mu}_N) + \bar{\mathcal{E}}(\bar{\mu}_Z) + \sum_{k,\lambda} \left(m_{k,\lambda} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k) \xi + \frac{1}{2} m_{k,\lambda}^2 \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k) \xi^2 + \tilde{\mathcal{E}}_\lambda(\mu_k, 0, \xi) \right) . \quad (9.65)$$

Les termes où n'apparaît qu'un seul $m_{k,\lambda}$ s'annulent en raison de la symétrie du moment angulaire. On retranche à l'équation précédente la partie oscillante de l'énergie du fondamental $\sum_{k,\lambda} \tilde{\mathcal{E}}_\lambda(\mu_k, 0, 0)$, on aboutit alors à :

$$E^1 - E^0 = \frac{1}{2} \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) \bar{\xi}^2 \langle m^2 \rangle + \sum_{k,\lambda} \left(\tilde{\mathcal{E}}_\lambda(\mu_k, 0, \xi) - \tilde{\mathcal{E}}_\lambda(\mu_k, 0, 0) \right) + \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) \tilde{\xi} \bar{\xi} \langle m^2 \rangle. \quad (9.66)$$

On calcule l'expression de $\tilde{\xi}$ à partir de l'équation (9.19)

$$M = \sum_{k,\lambda} \left(m_{k,\lambda} \bar{\mathcal{N}}_\lambda(\mu_k, \beta, \xi) + m_{k,\lambda} \tilde{\mathcal{N}}_{k,\lambda}(\mu_k, \beta, \xi) \right) \quad (9.67)$$

$$= \sum_{k,\lambda} \left(m_{k,\lambda} \bar{\mathcal{N}}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k, \bar{\beta}, \bar{\xi}) + m_{k,\lambda} \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k) \tilde{\mu}_k \right) + \sum_{k,\lambda} \left(m_{k,\lambda}^2 \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k) \tilde{\xi} + m_{k,\lambda} \tilde{\mathcal{N}}_\lambda(\mu_k, \beta, \xi) \right). \quad (9.68)$$

Or la partie moyenne satisfait à :

$$\sum_{k,\lambda} m_{k,\lambda} \bar{\mathcal{N}}_\lambda(\bar{\mu}_k, \bar{\beta}, \bar{\xi}) = M. \quad (9.69)$$

D'où :

$$\tilde{\xi} = - \frac{\tilde{M}}{\left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) \langle m^2 \rangle}. \quad (9.70)$$

Avec $\tilde{M} = \sum_{k,\lambda} m_{k,\lambda} \tilde{\mathcal{N}}_\lambda(\mu_k, \beta, \xi)$.

Sans utiliser la condition (9.69) mais en développant l'équation (9.67) on a :

$$M = \sum_{k,\lambda} m_{k,\lambda} \bar{\mathcal{N}}_\lambda(\bar{\mu}_k, \bar{\beta}, \bar{\xi}) + \sum_{k,\lambda} m_{k,\lambda}^2 \bar{\rho}_{k,\lambda}(\bar{\mu}_k) \tilde{\mu}_k \xi + \sum_{k,\lambda} m_{k,\lambda} \tilde{\mathcal{N}}_\lambda(\mu_k, \beta, \xi) \quad (9.71)$$

$$= \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) \langle m^2 \rangle \bar{\xi} + \left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) \langle m^2 \rangle \tilde{\xi} + \tilde{M}. \quad (9.72)$$

Ainsi à l'ordre dominant $\bar{\xi}$ s'écrit comme :

$$\bar{\xi} = \frac{M}{\left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z) \right) \langle m^2 \rangle}. \quad (9.73)$$

On utilise les équations (9.73) et (9.70) dans (9.66) :

$$E^1 - E^0 = \frac{M^2}{2\left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z)\right)\langle m^2 \rangle} + \tilde{\mathcal{E}}^1 - \tilde{\mathcal{E}}^0 - \widetilde{M\xi}. \quad (9.74)$$

Où $\tilde{\mathcal{E}}^1$ est la partie oscillante de l'énergie à température nulle mais pour un moment angulaire non minimum. En général les valeurs de M sont faibles (1, 2, 3), ses fluctuations le sont encore plus. On néglige donc le dernier terme de (9.74). D'après ce qui précède on peut maintenant exprimer Q^1 en fonction des variables fondamentales Q et M :

$$\begin{aligned} Q^1 &= Q - (E^1 - E^0) \\ &= Q - \left[\frac{M^2}{2\left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z)\right)\langle m^2 \rangle} + \sum_{k,\lambda} \left(\tilde{\mathcal{E}}_\lambda(\mu_k, 0, \xi) - \tilde{\mathcal{E}}_\lambda(\mu_k, 0, 0) \right) \right] \end{aligned} \quad (9.75)$$

On remplace l'expression de Q^1 dans (9.63). On effectue un développement limité en Q de \mathcal{S} , à l'ordre dominant et on somme sur λ . De plus, bien qu'en général le développement de Taylor des fonctions oscillantes soit prohibé [39], celles-ci sont lisses en fonction de la température (voir annexe C ou [55]). On peut donc remplacer au premier ordre T par \bar{T} . On aboutit alors à :

$$\mathcal{S} = 2\sqrt{\frac{\pi^2}{6}\left(\bar{\rho}_N(\bar{\mu}_N) + \bar{\rho}_Z(\bar{\mu}_Z)\right)}Q - \frac{M^2}{2\sigma^2} + \frac{1}{\bar{T}} \sum_k \left[\tilde{\mathcal{E}}(\mu_k, 0) - \tilde{\mathcal{E}}(\mu_k, \bar{T}) \right]. \quad (9.76)$$

L'entropie du système se compose donc de la partie lisse provenant de la partie Thomas-Fermi de la densité de niveaux à une particule comme obtenue au paragraphe précédent et d'une partie oscillante qui est fonction de la différence des parties oscillantes de l'énergie du fondamental et celle pour une température \bar{T} . Le potentiel chimique μ_k est fonction du nombre de particules du type k de fermion (voir (9.16) et (9.17)).

On obtient alors l'expression générale de la partie fluctuante de l'entropie pour un gaz de Fermi de l'article [5] :

$$\tilde{\mathcal{S}} = \frac{1}{\bar{T}} \left[\tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0) - \tilde{\mathcal{E}}(N, Z, \bar{T}) \right]. \quad (9.77)$$

Ce dernier résultat montre que ρ_{MB} dépend des fluctuations de l'énergie du fondamental. Comme annoncé en introduction ce résultat justifie donc les deux premières parties. On remarque que tout comme le cas de l'énergie du

fondamental d'un gaz de Fermi, $\tilde{\mathcal{S}}$ a des fluctuations en fonction du nombre de particules et sa valeur moyenne à température fixée n'est pas nulle. Ainsi d'après les études sur la partie moyenne de l'énergie [39, 40] de la deuxième partie, la valeur moyenne de $\tilde{\mathcal{S}}$ est d'autant plus importante que le degré de symétrie du système sera grand.

L'article intitulé "*Level Density of a Fermi Gas : Average Growth and Fluctuations*" [5] traite plus particulièrement de l'application de ces derniers résultats au modèle nucléaire mais sans approfondir l'étude de la partie moyenne. Une discussion entre théorie et expérience y est proposée. Nous retrouvons notamment l'expression phénoménologique standard du paramètre a [56] discutée en introduction dérivée ici de manière analytique. Les résultats de l'article suggèrent que le terme (9.77) est correct au-delà de l'approximation champ moyen et que la signature des effets de type pairing, interactions coulombiennes, *etc.* à la densité de niveaux n'est contenue qu'à travers les fluctuations de l'énergie du fondamental.

Level Density of a Fermi Gas: Average Growth and Fluctuations

Patricio Leboeuf and Jérôme Roccia

Laboratoire de Physique Théorique et Modèles Statistiques, Bâtiment 100, Université de Paris-Sud, 91405 Orsay Cedex, France
(Received 13 February 2006; published 5 July 2006)

We compute the level density of a two-component Fermi gas as a function of the number of particles, angular momentum, and excitation energy. The result includes smooth low-energy corrections to the leading Bethe term (connected to a generalization of the partition problem and Hardy-Ramanujan formula) plus oscillatory corrections that describe shell effects. When applied to nuclear level densities, the theory provides a unified formulation valid from low-lying states up to levels entering the continuum. The comparison with experimental data from neutron resonances gives excellent results.

DOI: [10.1103/PhysRevLett.97.010401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.010401)

PACS numbers: 03.75.Ss, 21.10.Ma, 24.60.-k

Many physical properties of interacting Fermi gases depend on the number of available states at a given energy, like, for instance, the optical and electrical response of solids, or the reaction rates in nuclear processes. The most common framework to compute the many-body (MB) density of states (DOS) is a mean-field approximation, where each (quasi)particle moves independently in an average self-consistent potential. In this case, the energy of the Fermi gas is expressed as the sum of the occupied single-particle (SP) energies. The computation of the MB DOS is thus reduced to a combinatorial problem: to count the different ways into which the energy can be distributed among the particles. A first answer to this question was given by Bethe [1], who showed that at high excitation energies Q (compared to the SP spacing at Fermi energy ϵ_F) and for two types of fermions (protons and neutrons), the MB density grows like $\rho_{\text{MB}}(Q) \sim \exp(2\sqrt{aQ})/Q^{5/4}$. The Fermi gas parameter $a = \pi^2 \bar{\rho}(\epsilon_F)/6$ depends only on the average SP DOS at ϵ_F , $\bar{\rho}(\epsilon_F)$.

In practice, the parameter a is often used as a fitting parameter. For a given excitation energy Q and particle number A , $a(Q, A)$ is extracted from the available experimental data. In this way, important deviations from the independent particle model predictions are observed. Though there are certainly effects that are beyond that model, our purpose here is to show that a detailed treatment is able to describe features of individual systems with good accuracy, therefore providing a solid theoretical basis for extrapolations to unknown regions and for improvements. Generalizing the results obtained in Ref. [2] to a two-component system of given angular momentum, we show that Bethe's result can be viewed as the first (smooth) term of an expansion. The corrections to that term do not enter as corrections of the a parameter (as was often assumed in the past), but simply as additional terms in the exponential. A first series of terms are smooth in A and Q , and provide higher-order (in inverse powers of the excitation energy) corrections. Keeping only the first correction generates a uniform expression, which cancels the divergence produced by the $Q^{-5/4}$ term at low energies, and therefore make

unnecessary the use of composite models (à la Gilbert-Cameron). On top of the smooth contributions are oscillatory terms, that describe density fluctuations as A varies. These are shell effects, which turn out to be related to the fluctuations of the total energy of the system. A detailed description of these fluctuations and of the relevant energy scales is provided. Finally, a comparison of the results with the nuclear level density at neutron threshold is made. With a few adjustable parameters, a very good overall agreement is obtained, with a relative error $\lesssim 10\%$ for the logarithm of the density of the 295 nuclei analyzed.

From a theoretical point of view, Ref. [2] and the present work may be viewed as a generalization to MB systems of the theory developed to describe the SP DOS [3–5]. Previous works have considered the high-energy (Maxwell-Boltzmann) limit [6], while here we concentrate on the regime of a large number of particles and $Q < \epsilon_F$.

The DOS at energy E of a system composed of Z protons, N neutrons, and with projection M of the angular momentum on some given axis is defined as

$$\rho_{\text{MB}}(E, N, Z, M) = \sum_{\nu} \delta(E - E^{\nu}) \delta(N - A_N^{\nu}) \delta(Z - A_Z^{\nu}) \times \delta(M - M^{\nu}). \quad (1)$$

The index ν denotes all the possible neutron and proton SP configurations (of arbitrary number of particles), $A_{\lambda}^{\nu} = \sum_i n_{\lambda,i}^{\nu}$ are the neutron and proton number of particles, respectively ($n_{\lambda,i}^{\nu} = 0, 1$ are the corresponding occupation numbers of the i th SP state, and $\lambda = N$ or P); $E^{\nu} = \sum_{\lambda} \sum_i n_{\lambda,i}^{\nu} \epsilon_{\lambda,i}$ and $M^{\nu} = \sum_{\lambda} \sum_i n_{\lambda,i}^{\nu} m_{\lambda,i}$ are the energy and angular momentum projection, where $\epsilon_{\lambda,i}$ and $m_{\lambda,i}$ denote the SP energies and angular momentum projections, respectively.

The conservation of the angular momentum projection is introduced in order to deal with only a subset of states, those with given total angular momentum J . A standard treatment [7,8] of this degree of freedom leads to a DOS of angular momentum J of the form

$$\rho_{\text{MB}}(Q, N, Z, J) = \frac{2J+1}{2\sqrt{2\pi}\sigma^3} e^{-(J+1/2)^2/2\sigma^2} \rho_{\text{MB}}(Q, N, Z), \quad (2)$$

where $\rho_{\text{MB}}(Q, N, Z)$ is the total MB DOS, $Q = E - E_0$ is the excitation energy measured with respect to the ground-state energy of the system, and σ is the spin cutoff parameter.

For an arbitrary SP spectrum the computation of the density of excited states is a difficult combinatorial problem for which no exact solution exists. There is, however, a particular case that can be worked out explicitly: when the SP spectrum consists of equidistant levels separated by δ (we assume, for simplicity, that the neutron and proton spacings are equal). The MB excitation energies are then given by the sum of two integers corresponding to the total energy of each of the components, $Q = (j+k)\delta = K\delta$. Each MB state characterized by an integer K has a non-trivial degeneracy. The computation of the degeneracy reduces to the computation of the number of ways into which the total energy may be distributed among the two components, and of the different ways the partial energy of each component can be distributed among its elements. This leads us to compute the value of the function $p_2(K) = \sum_{j=1}^K p(j)p(K-j)$, where $p(j)$ is the partition of j (the number of ways into which the integer j can be decomposed as a sum of integers). We are assuming here, to avoid finite size effects, that the excitation energy is small compared to the Fermi energy of each component. Based on the work of Hardy and Ramanujan, an exact expression (written as a convergent series) for $p(j)$ was obtained by Rademacher [9]. We have adapted their method (i.e., the circle method, cf. Ref. [10]) to obtain an exact formula for $p_2(K)$. Putting back the appropriate units, the MB density can be expressed in terms of p_2 as $\rho_{\text{MB}}/\bar{\rho} = 2^{1/4} p_2(K = \bar{\rho}Q/2)$, where $\bar{\rho} = \bar{\rho}_p + \bar{\rho}_n = 2/\delta$ is the total (proton + neutrons) SP average density. Then, expressing the exact result as an expansion in terms of $\bar{\rho}Q$ valid in the range $\bar{\rho}^{-1} \ll Q < N\delta, Z\delta$, we obtain

$$\rho_{\text{MB}}(Q, N, Z)/\bar{\rho} = \frac{6^{1/4}}{12(\bar{\rho}Q)^{5/4}} e^{\mathcal{S}} \quad (3)$$

where the ‘‘entropy’’ $\mathcal{S} = \mathcal{S}_{\text{eq}}$ of the equidistant spectrum is given by

$$\mathcal{S}_{\text{eq}} = 2\sqrt{\frac{\pi^2}{6} \bar{\rho}Q} - \left(\frac{\pi}{36} + \frac{15}{16\pi}\right) \frac{\sqrt{6}}{\sqrt{\bar{\rho}Q}} + \left(\frac{35}{96} + \frac{\pi^2}{432}\right) \frac{1}{\bar{\rho}Q} \quad (4)$$

plus $\mathcal{O}((\bar{\rho}Q)^{-3/2})$ corrections that can be computed but are not given here. The prefactor in Eq. (3) and the first term of the expansion (4) reproduce Bethe’s formula [1]. The additional terms provide further smooth corrections of higher order in inverse powers of the excitation energy. Though Eq. (4) represents an asymptotic expansion, we find that an accurate uniform approximation is obtained by keeping

only up to the $1/\sqrt{\bar{\rho}Q}$ term that destroys, when $Q \rightarrow 0$, the divergence produced by the $(\bar{\rho}Q)^{-5/4}$ in the prefactor. It is also interesting to note that the correct coefficients of the correction terms in (4) are obtained through the expansion of the exact result, whereas a saddle point approximation of the sum involved in $p_2(K)$ leads to wrong coefficients.

The previous expression describes in detail the MB DOS for a SP spectrum made of equidistant levels. However, it is clearly unphysical in most situations. A generic SP spectrum contains *fluctuations*, which are manifested at the scale of the average distance between levels, but also on much larger scales (see Ref. [11] for a review). What is missing in Eq. (3) are the fluctuations in the MB density induced by the SP fluctuations. In this respect, one may consider Eq. (3) as the MB analog of the Weyl or Wigner-Kirkwood expansions.

It remains for us to compute the MB level density for an arbitrary SP spectrum, including fluctuations. The way to do it was shown, for a single-component gas, in Ref. [2]. The method uses a saddle point approximation of the inverse Laplace transform of the MB density. We have adapted that calculation, following similar lines to treat Eq. (1), which includes two components and angular momentum conservation. The result may be written under the form of Eqs. (2) and (3), but with the entropy in the latter equation given by

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}_{\text{eq}} + \frac{1}{T} [\tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0) - \tilde{\mathcal{E}}(N, Z, T)]. \quad (5)$$

The parameter T is the temperature, connected to the excitation energy Q through the usual relation $Q = \pi^2 \bar{\rho} T^2 / 6 = aT^2$. $\tilde{\mathcal{E}}(N, Z, T) = \sum_{\lambda} \int d\epsilon \tilde{\rho}_{\lambda}(\epsilon) \epsilon f(\epsilon, \mu, T)$ is the fluctuating part of the energy of the system at temperature T and chemical potential $\mu \sim \epsilon_F$ fixed, neglecting temperature variations, by the particle-number conditions $N \sim Z = \int^{\epsilon_F} d\epsilon \rho_{\lambda}(\epsilon)$. The function $\rho_{\lambda}(\epsilon) = \sum_j \delta(\epsilon - \epsilon_{\lambda,j})$ is the SP density of the component λ , and $\tilde{\rho}_{\lambda}(\epsilon) = \rho_{\lambda}(\epsilon) - \bar{\rho}_{\lambda}(\epsilon)$ its fluctuating part. $\tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0)$ is thus the fluctuating part of the ground-state energy of the system. Finally, \mathcal{S}_{eq} in Eq. (5) is given by Eq. (4), with $\bar{\rho}$ the total average SP density of the system at Fermi energy. In fact, for an arbitrary spectrum the saddle point technique does not allow to derive the terms of order $(\bar{\rho}Q)^{-1/2}$ and higher in \mathcal{S}_{eq} . The corrections obtained from an equidistant spectrum are thus conjectured to provide a good approximation to the corrections of the smooth part of an arbitrary system, but the validity of this statement has to be confirmed. An explicit numerical verification of its validity for a two-dimensional one-component system was done in Ref. [2].

The function $\tilde{\mathcal{E}}(N, Z, T)$ presents oscillations when N or Z are varied, in contrast to the more gentle variations as a function of T (a detailed description of the fluctuations and of their T dependence is given below). The MB level density contains now two types of terms: some that vary

smoothly, and others that fluctuate as the number of particles changes. The result presented above contains the dominant smooth and oscillatory terms. In the derivation of Eqs. (2), (3), and (5), we have neglected other terms [for instance, the chemical potentials and T have small corrections that depend on J , and thus strictly speaking the factorization (2) of the angular momentum is not exact, etc.]. A detailed account of the derivation will be given elsewhere.

It is remarkable that the MB level density at excitation energy Q depends explicitly on the ground-state energy fluctuations $\tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0)$. A convenient way to analyze the behavior of the fluctuating part of the entropy $\tilde{\mathcal{S}} = [\tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0) - \tilde{\mathcal{E}}(N, Z, T)]/T$ is through a semiclassical theory. The result is an expression for $\tilde{\mathcal{S}}$ written as a sum over all the classical periodic orbits of the mean field potential. The main conclusions that can be drawn from that expression are now listed. To be specific, we consider the particular case of an atomic nucleus of Z protons and N neutrons: (a) as the mass number $A = Z + N$ varies at fixed excitation energy Q , $\tilde{\mathcal{S}}$ presents oscillations of characteristic period $\delta A \approx (\pi/3)A^{2/3}$, which are independent of Q ; (b) when Q varies at fixed particle number A , $\tilde{\mathcal{S}}$ does not present similar oscillations, but rather gentle variations; (c) the typical amplitude $\sigma_{\tilde{\mathcal{S}}}$ of $\tilde{\mathcal{S}}$ at given (Q, A) depends on the dynamical properties of the classical dynamics (integrable or chaotic); (d) since the mean field dynamics of most nuclei is well approximated by a regular motion [11], then the behavior of the typical amplitude of $\tilde{\mathcal{S}}$ is given, to a first approximation, by those of a regular dynamics, that we now detail; (e) using the definition of the temperature $T = \sqrt{Q/a}$ with $a = \pi^2 \bar{\rho}/6 \approx A/15 \text{ MeV}^{-1}$ [12], we find that there is only one relevant temperature scale in the variation of $\sigma_{\tilde{\mathcal{S}}}$ with T , given by $T_c \approx 4/A^{1/3} \text{ MeV}$ (directly related to the system size—see [2]); for convenience we also introduce $T_\delta = (2\pi^2 \bar{\rho})^{-1} \approx 1.3/A \text{ MeV}$ (the temperature associated with the SP mean level spacing), and $g = T_c/T_\delta \approx 3A^{2/3}$; (f) at low temperatures, $\sigma_{\tilde{\mathcal{S}}} \approx \sqrt{T/T_\delta}$; the typical amplitude of shell effects in the MB DOS therefore increases from 0 at $T = 0$ up to $\sim \sqrt{g}$ at $T \sim T_c$; (g) at temperatures of order T_c the amplitude is maximal, and starts to decrease for $T > T_c$; (h) in the limit $T \gg T_c$ the typical amplitude tends to zero as $\sigma_{\tilde{\mathcal{S}}} \approx \sqrt{g/6} T_c/T$; using the previous values of T_c and g this gives $\sigma_{\tilde{\mathcal{S}}} \approx 2\sqrt{2}/T \text{ MeV}$; we thus predict a slow power-law decay of the amplitude of shell effects at high temperatures.

We now turn to a direct application of the previous results to experimental data. Though it will be important to make a systematic analysis of the validity of Eqs. (2), (3), and (5), and of their predictions at different energies and mass numbers, we restrict ourselves here to a comparison with slow neutron resonances, which have been experimentally studied for a large number of nuclei [13]. The excitation energies of neutron resonances coincide

with the neutron binding energies, $Q = Q_n = S_n(N, Z)$, whose values are in the range 6–8 MeV for most nuclei. This corresponds to a temperature $T_n \approx 8/\sqrt{A} \text{ MeV}$. According to the previous results, the typical amplitude of the fluctuations depends on temperature, with a maximum at $T \approx T_c$. At neutron resonances the ratio $T_n/T_c \approx 2/A^{1/6}$. From $A = 30$ to $A = 250$, this ratio varies from 1.13 to 0.8. We thus find that at excitation energies $Q \approx Q_n$, the temperature is very close to T_c ; shell effects are maximal. We expect a typical value of $\tilde{\mathcal{S}}(Q, N, Z)$ very close to its maximum $\sim \sqrt{g} \approx \sqrt{3}A^{1/3}$ (this varies from 5.4 to 11 in the previous range of A). In contrast, in the same particle-number range the first correcting term [proportional to $(\bar{\rho}Q)^{-1/2}$] in the smooth expansion (4) varies from 0.32 to 0.11. That term, and the following ones in the expansion, can thus be neglected at $Q \approx Q_n$.

To make a comparison with experiments we need the different quantities involved in the theoretical expressions. The quantity $(\tilde{\mathcal{E}}N, Z, T_n)$ is, semiclassically, written as a sum over the periodic orbits p (and repetitions) of the mean field potential [11]. The analysis of the temperature dependence of that sum and of the main contributing orbits leads to the approximation $\tilde{\mathcal{E}}(N, Z, T_n) \approx \bar{\kappa}_n \tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0)$, where $\bar{\kappa}_n$ is the average over the shortest periodic orbits p of the function $\kappa(x_p) = x_p/\sinh(x_p)$, where $x_p = 3\pi\ell_p A^{1/3} T_n/(4\epsilon_F)$ and ℓ_p is the length of the periodic orbit p measured in units of the nuclear radius (notice the mass number and temperature dependence of x_p). For each nucleus, A and T_n are given and the average $\bar{\kappa}_n = \bar{\kappa}(N, Z, T_n)$ is computed. In practice, the average is estimated using the shortest periodic orbits of a spherical cavity of radius $R = 1.2A^{1/3} \text{ fm}$.

The expression of the entropy \mathcal{S} in Eq. (3) takes now the form

$$\mathcal{S}(Q_n, N, Z) = 2\sqrt{aQ_n} + (1 - \bar{\kappa})\tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0)/T_n. \quad (6)$$

Finally, a , Q_n , and $\tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0)$ are required. One possibility is to compute them from a particular model. In our case, however, in order to avoid model-dependent features and to make a direct test of our predictions, we prefer to extract as much information as possible from experimental data. For each nucleus, the excitation energy at neutron threshold $Q = Q_n = S_n(N, Z)$ is taken from the experimental value of $S_n(N, Z)$, and $T_n(N, Z) = \sqrt{Q_n/a}$. Analogously, $\tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0)$ can be obtained from the experimental value of the ground-state energy. It corresponds to the fluctuating part of the nuclear binding energy. Thus, nuclear effects that may depend on A , like deformations, are automatically incorporated. This quantity is computed by subtracting from the 1995 Audi-Wapstra compilation [14] the liquid drop expression $\bar{\mathcal{E}} = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c Z^2/A^{1/3} - a_A (N - Z)^2/A$, using the parameters (from Ref. [15]) $a_v = 15.67$, $a_s = 17.23$, $a_A = 23.29$, and $a_c = 0.714$ (all in MeV; we have moreover excluded the pairing term). This parametrization produces a fluctuating part whose average

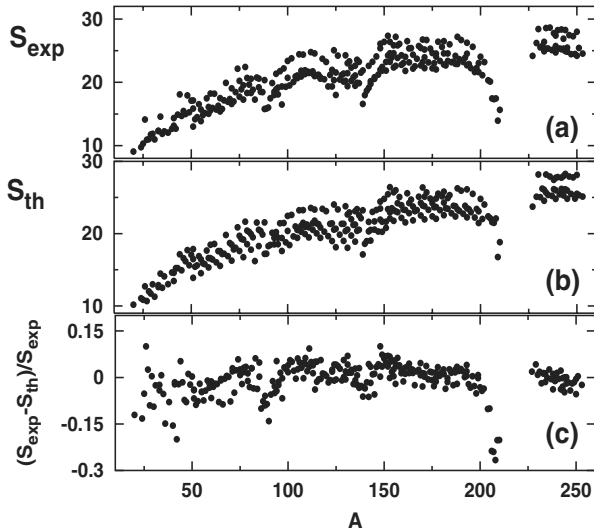


FIG. 1. Entropy S as a function of the mass number A for nuclear level densities at neutron threshold. (a) experimental values; (b) theoretical prediction; (c) relative error.

(over A) $\langle \tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0) \rangle_A \approx 0$. However, the determination of the average of the fluctuating part is a delicate question that deserves a careful discussion. Because of the discrete variation of the chemical potential as the mass number varies, one can verify that generically $\langle \tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0) \rangle_A$ is non-zero. We have therefore added to the fluctuating part a term $bA + c$, where b and c are two constants. Equation (6) thus depends on three constants, a , b , and c , that we fix by minimizing the root mean square error with respect to the experimental value of the density, S_{exp} [obtained by computing S from Eqs. (2) and (3) when $\rho_{\text{MB}}(Q, N, Z, J)$ is the experimental DOS, J the ground-state angular momentum and $\sigma^2 \approx 0.15aA^{2/3}T_n$ [13]]. The result is $a = A/10.42 \text{ MeV}^{-1}$, $b = -0.019 \text{ MeV}$ and $c = 7.9 \text{ MeV}$. The comparison is made in Fig. 1. The experimental values S_{exp} shown on the top part are to be compared with the “theoretical” entropies plotted in the middle part. A clear overall agreement is observed. For most nuclei, the relative error in the lower panel is smaller than 10%, with some remaining structure as a function of A , and larger deviations for closed shells (we suspect that this is due to our very schematic estimate of $\bar{\kappa}_n$, and/or of σ^2 , cf. Ref. [16]).

The precision of the present calculation, with only three adjusted parameters, is comparable to the best fits obtained nowadays. We can, in fact, make the comparison more precise by noticing that Eq. (6) can be approximated, using an effective value of a , by $S(Q_n, N, Z) \approx 2\sqrt{a_{\text{ef}}Q_n}$, where $a_{\text{ef}} = a[1 + \tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0)(1 - \bar{\kappa})/Q_n]$. Under this form, Eq. (6) is quite similar to one of the best phenomenological formulas studied so far, proposed by Ignatyuk and collaborators [13,17].

To conclude, we have derived an explicit formula for the MB DOS of a two component Fermi gas of fixed angular

momentum. The results were applied to the particular case of nuclear level densities, where precise predictions for the smooth dependence and shell fluctuations as a function of excitation energy and mass number were made. Different nuclear effects, like deformations, were explicitly taken into account through the function $\tilde{\mathcal{E}}(N, Z, 0)$. Good agreement between theory and experiment in the region of neutron resonances was found. Although it was derived within an independent particle model, the comparison with experiments shows that the final result is probably of more general validity and includes, through the energy fluctuations $\tilde{\mathcal{E}}$, effects like pairing. Going to high excitation energies, the main prediction is the decay of shell effects when $Q \gtrsim Q_n$ (with a power-law tail). However, that prediction is valid for closed systems. Before proceeding in that direction, the theory should be improved to include finite size effects (e.g. a finite number of nucleons) as well as the influence of the continuum.

Laboratoire de Physique Théorique et Modèles Statistiques is Unité de recherche associée au CNRS. We acknowledge fruitful discussions with C. Schmit. This work was supported by grants ACI Nanoscience 201, ANR NT05-2-42103, ANR-05-Nano-008-02 and the IFRAF Institute.

- [1] H. A. Bethe, Phys. Rev. **50**, 332 (1936).
- [2] P. Leboeuf, A. G. Monastera, A. Relaño, Phys. Rev. Lett. **94**, 102502 (2005).
- [3] H. P. Baltes and E. R. Hilf, *Spectra of Finite Systems* (Bibliographisches Institut-Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1976).
- [4] R. Balian and C. Bloch, Ann. Phys. (N.Y.) **69**, 76 (1972).
- [5] M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. (N.Y.) **10**, 1004 (1969).
- [6] H. M. Sommermann and H. A. Weidenmüller, Europhys. Lett. **23**, 79 (1993); H. A. Weidenmüller, Phys. Rev. A **48**, 1819 (1993); J. Sakhr and N. D. Whelan, Phys. Rev. E **67**, 066213 (2003).
- [7] C. Bloch, Phys. Rev. **93**, 1094 (1954).
- [8] T. Ericson, Adv. Phys. **9**, 425 (1960).
- [9] G. H. Hardy and S. Ramanujan, Proc. London Math. Soc. **17**, 75 (1918); H. Rademacher, Proc. London Math. Soc. **43**, 241 (1937).
- [10] G. E. Andrews, *The Theory of Partitions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998).
- [11] P. Leboeuf, Lect. Notes Phys. **652**, 245 (2005).
- [12] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure* (Benjamin, Reading, Massachusetts, 1969), Vol. I.
- [13] Handbook for calculation of nuclear reaction data RIPL-2, <http://www-nds.iaea.org/ripl-2>.
- [14] G. Audi and A. H. Wapstra, Nucl. Phys. A **595**, 409 (1995).
- [15] B. Povh *et al.*, *Particles and Nuclei: An Introduction to the Physical Concepts* (Springer-Verlag, New York, 1995).
- [16] J. R. Huizenga *et al.*, Nucl. Phys. A **223**, 577 (1974).
- [17] A. V. Ignatyuk, G. N. Smirenkin, A. S. Tishin, Sov. J. Nucl. Phys. **21**, 255 (1975).

9.3 Comparaison entre la théorie et le numérique

Nous nous intéressons maintenant au comportement de $\tilde{\mathcal{S}}(N, Z, \bar{T})$. Nous supposons que les deux types de fermion se comportent de manière identiques. Dans ce cas il est suffisant d'étudier cette quantité pour un seul type de fermion. Nos paramètres seront la température T du système et le nombre N de fermions. Le potentiel chimique sera imposé par l'équation (9.16).

On a donc :

$$\tilde{\mathcal{S}}(N, \bar{T}) = \frac{1}{\bar{T}} \left[\tilde{\mathcal{E}}(N, 0) - \tilde{\mathcal{E}}(N, \bar{T}) \right]. \quad (9.78)$$

Avec par définition (cf. (9.18)) :

$$\tilde{\mathcal{E}}(N, \bar{T}) = \sum_{\lambda} \int \epsilon \tilde{\rho}_{\lambda}(\epsilon) f(\epsilon, \beta, \mu, \xi) d\epsilon.$$

Dans le cas de modèles simplifiés, on suppose que les fermions ne possèdent pas de moment angulaire. Les interactions sont simulées par un modèle de champ moyen décrit par un potentiel qui satisfait soit à la théorie de Thomas-Fermi, soit à un développement en série de Weyl. Dans ce cas la théorie des orbites périodiques développée dans le chapitre 2 permet d'explicitier l'équation (9.18).

On a donc :

$$\tilde{\mathcal{E}}(N, T) = \sum_{op} \frac{A_{op}(\mu_N)}{\tau_{op}(\mu_N)^2} \kappa \left(\frac{\tau_{op}(\mu_N)}{\tau_T} \right) \cos(S_{op}(\mu_N) + \nu_{op}). \quad (9.79)$$

Où $\kappa(x) = x/\sinh(x)$ est le facteur de température avec $\tau_T = 1/\pi T$ (voir annexe C ou [57]). On a posé $\hbar = m = 1$. Plus les orbites sont longues plus κ est petit. De même plus la température est grande plus κ est petit. L'analyse précise de l'amplitude de (9.78) fait intervenir le facteur de forme du système [54, 5]. Sa variation dépend donc du type de dynamiques, intégrable ou chaotique. De manière générale on peut dire que pour un système intégrable, la variance de $\tilde{\mathcal{S}}$ croît linéairement avec la température jusqu'à une température de l'ordre de $E_{min}/2\pi^2$. Puis décroît comme $1/T^2$. Pour un système chaotique, l'amplitude croît linéairement avec la température jusqu'à un plateau à $1/2\pi^2\bar{\rho}$. Puis à partir de $E_{min}/2\pi^2$ elle décroît comme T^2 ($\tilde{\mathcal{E}}(N, T)$ décroît exponentiellement avec T).

Pour calculer numériquement la densité de niveaux nous avons utilisé le programme "totstade.f90" [58]. Les potentiels utilisés sont les oscillateurs harmoniques à 2 et 3 dimensions isotropes. On rappelle que dans le cas d'un 3D

ISO HO de fréquence unité, la théorie semiclassique donne pour $\tilde{\rho}$ [13, 42, 40] :

$$\tilde{\rho}(\epsilon) = 2\epsilon^2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \cos(2\pi k\epsilon) . \quad (9.80)$$

On a alors $\tau_{op} = 2\pi k$. D'après l'expression de $\tilde{\mathcal{E}}(N, T = 0)$ donnée dans [40] et grâce à l'équation (9.79) on en déduit que

$$\tilde{\mathcal{E}}(N, T) = \frac{(3N)^{2/3}}{2\pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k \kappa(2\pi^2 kT)}{k^2} \cos(2\pi k(3N)^{1/3}) . \quad (9.81)$$

Les parties lisses $\bar{\mathcal{N}}$ et $\bar{\rho}$ sont données par [13, 42, 40] :

$$\bar{\rho}(\epsilon) = \mu^2 - 1/4 , \quad (9.82)$$

$$\bar{\mathcal{N}}(\mu) = \frac{1}{3}(\mu^3 - \mu/4) . \quad (9.83)$$

On utilise la condition (9.12) dans (9.83) et (9.82), on obtient alors l'expression de $\bar{\rho}Q$ pour le ISO HO 3D en fonction de N et Q :

$$\bar{\rho}Q = (3N)^{2/3}Q . \quad (9.84)$$

On remplace cette dernière valeur dans l'expression de la partie lisse de l'entropie $\bar{\mathcal{S}}_{eq}$ mais pour un seul type de particules. Celle-ci est donnée dans [52]. On obtient alors la formule de l'entropie totale pour un ISO HO 3D à l'ordre $1/\sqrt{\bar{\rho}Q}$:

$$\mathcal{S} = \bar{\mathcal{S}}_{eq} + \tilde{\mathcal{S}} \quad (9.85)$$

$$\begin{aligned} &= 2\sqrt{\frac{\pi^2}{6}(3N)^{2/3}Q} - \left(\frac{\pi^2 + 72}{24\sqrt{6}\pi}\right) \frac{1}{\sqrt{(3N)^{2/3}Q}} \\ &\quad + \frac{(3N)^{2/3}}{2\pi^2 T} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k (1 - \kappa(2\pi^2 kT))}{k^2} \cos(2\pi k(3N)^{1/3}) . \end{aligned} \quad (9.86)$$

Nous comparons ce dernier résultat au calcul numérique dans la figure 9.1.

A température fixe, on remarque que le comportement général de \mathcal{S} est proche de celui de l'énergie du fondamental pour le même type de potentiel : on a les mêmes effets de couche. La différence de convexité entre le numérique et l'analytique est aussi retrouvée (voir figure 2 dans [40]). On rappelle que cela provient du fait que le système possède un fort degré de symétrie, le potentiel chimique n'est bien défini que pour une couche pleine.

A nombre de particules fixé, l'amplitude de $\tilde{\mathcal{S}}$ est contrôlée par κ [54] :

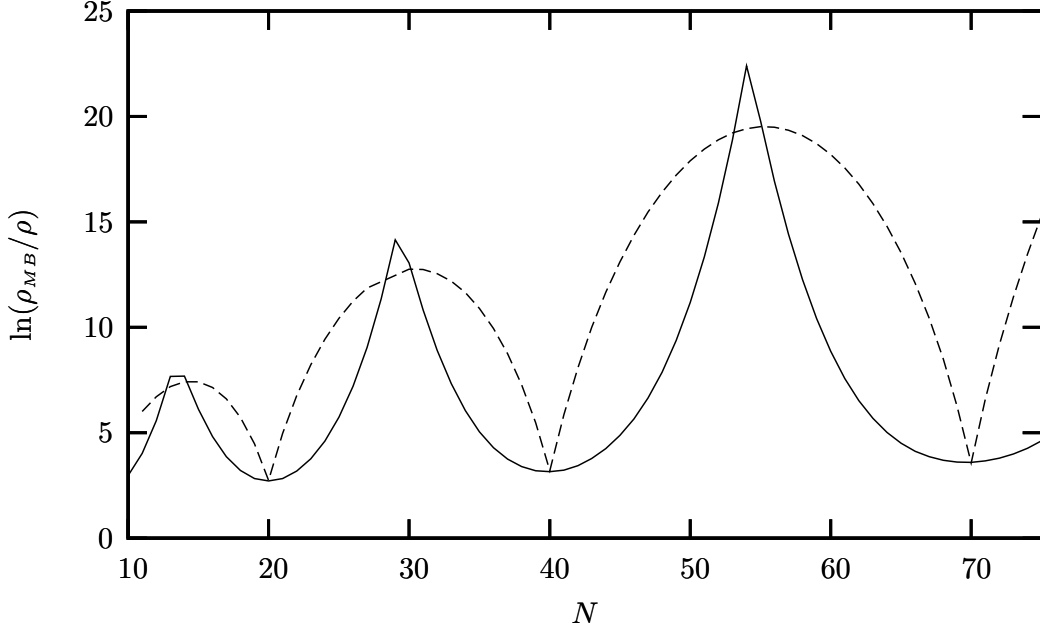


FIG. 9.1 – Le logarithme de la densité de niveaux à N -corps pour N fermions sans interaction dans un ISO HO 3D avec pour fréquence fondamentale l'unité pour une énergie d'excitation de une unité. En traits discontinus, le résultat numérique. En ligne continue, l'expression (9.86).

pour un système intégrable, lorsque $\tau_{op}/\tau_T \ll 1$, c'est à dire pour de faibles températures comparées à l'énergie de la plus petite des orbites $\tilde{\mathcal{S}} \propto T$. Pour $\tau_{op}/\tau_T \gg 1$, $\tilde{\mathcal{S}} \propto 1/T$. Pour $\tau_{op}/\tau_T \approx 1$, $\tilde{\mathcal{S}}$ est maximum.

La figure 9.2 illustre ce comportement pour des fermions sans interaction dans un potentiel harmonique isotrope à deux dimensions (ISO HO 2D).

La valeur moyenne de $\tilde{\mathcal{S}}$ sur le nombre de particules à température fixe n'est pas nulle. En effet nous avons remarqué dans [39] que $\langle \tilde{E}(N, T = 0) \rangle_N \neq 0$. Bien qu'il n'existe pas pour l'instant de théorie générale décrivant $\langle \tilde{E}(N, T) \rangle_N$ pour une température quelconque, le cas du potentiel harmonique est facilement calculable. En effet τ_{op}/τ_T est indépendant de μ . On approxime κ par sa valeur pour l'orbite la plus courte ($k=1$), on obtient alors $\langle \tilde{\mathcal{S}}(N, T) \rangle_N$:

$$\langle \tilde{\mathcal{S}}(N, T) \rangle_N \approx \frac{(1 - \kappa(2\pi^2 T))}{T} \langle \tilde{E}(N, T = 0) \rangle_N \approx \frac{(1 - \kappa(2\pi^2 T))}{24T} (3N)^{2/3}. \quad (9.87)$$

On peut donc tirer une compréhension générale de la partie moyenne de

l'entropie. Celle-ci est composée de deux termes dont les origines sont très différentes :

D'une part des termes provenant de la partie lisse de ρ . Ils sont peu sensibles aux déformations du potentiel et à sa dynamique.

D'autre part des termes issus de $\tilde{\rho}$ très sensibles à la forme du potentiel et dont la dépendance en température implique une étude fine du facteur de forme du système [54, 39, 5]. Dans [52] où le potentiel est un billard rectangulaire à côtés irrationnels, c'est le premier type de comportement qui est dominant. Dans l'étude menée dans ce paragraphe c'est le deuxième type de comportement qui importe. On soulignera que la dépendance en N de l'équation (9.87) est plus importante que le terme dominant de la partie lisse de l'entropie de l'équation (9.86).

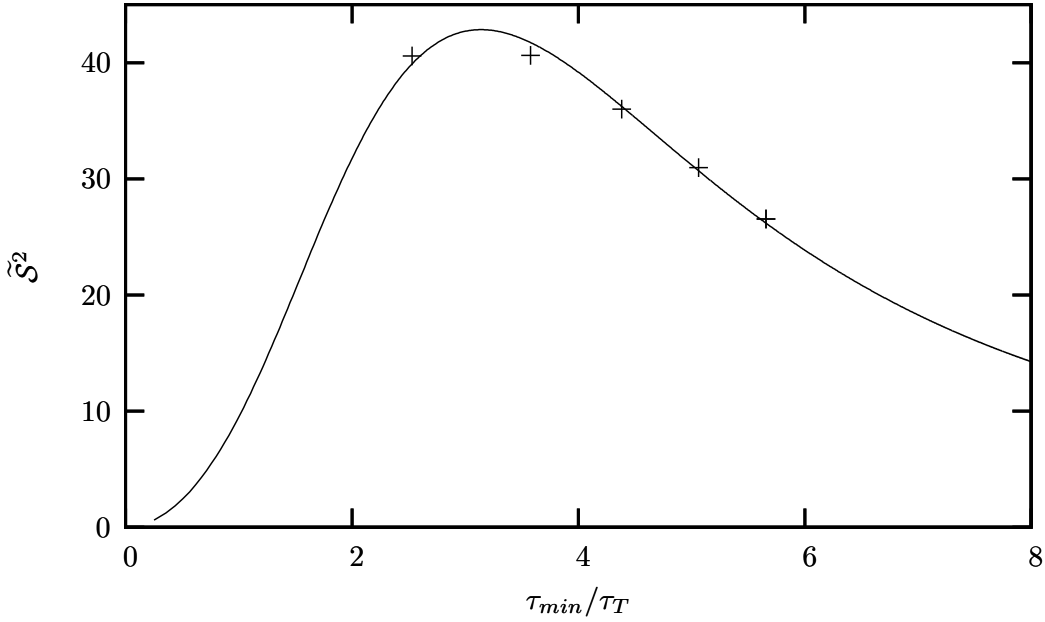


FIG. 9.2 – Le carré de la partie oscillante de l'entropie en fonction du rapport τ_{min}/τ_T pour $N=342$ et pour un potentiel harmonique isotrope à 2 dimensions. En trait continu, l'expression semiclassical (9.79) insérée dans (9.77) (pour un type de particule seulement). Les croix représentent la quantité $\left[\ln(\rho_{MB}/\bar{\rho}) - \bar{\mathcal{S}}_{eq} + \ln[\sqrt{48}(3N)^{2/3}Q] \right]^2$ où ρ_{MB} est évaluée numériquement et $\bar{\mathcal{S}}_{eq}$ est définie par l'équation (9.86).

Chapitre 10

Régime haute température : partie fluctuante

Lorsque le potentiel chimique est négligeable devant la température, le nombre moyen d'occupation pour des fermions ou des bosons est donné par la statistique de Maxwell-Boltzmann. On pose $\hbar = m = 1$.

On considère ici le système d'un seul type de particules sans moment angulaire plongés dans un potentiel champ moyen. On suppose que la partie moyenne de la densité de niveaux à une particule est donnée par $\bar{\rho} = \nu \epsilon^{\nu-1}$. On a donc pour la partie lisse des grandeurs thermodynamiques les valeurs du paragraphe §7.4. Alors que pour le régime basse température \bar{T} est fonction de l'énergie d'excitation, et dépend du comportement du système à température nulle, dans le cas du régime haute température, \bar{T} est fonction de l'énergie totale du système. Il en découle que le développement en partie lisse et oscillante de l'entropie ne fera pas apparaître de termes oscillants à basse température. On rappelle que l'entropie du système est donnée par l'équation (5.3). Cette dernière se réécrit en :

$$(\bar{T} + \tilde{T})\mathcal{S} = E - \bar{\Omega}(\mu, T) - \tilde{\Omega}(\mu, T) - (\bar{\mu} + \tilde{\mu})N . \quad (10.1)$$

Or le développement de Taylor de $\bar{\Omega}$ donne :

$$\bar{\Omega}(\mu, T) = \bar{\Omega}(\bar{\mu}, \bar{T}) + \frac{\partial \bar{\Omega}}{\partial \bar{\mu}} \tilde{\mu} + \frac{\partial \bar{\Omega}}{\partial \bar{T}} \tilde{T} . \quad (10.2)$$

De plus on a les identités thermodynamiques suivantes :

$$\frac{\partial \bar{\Omega}}{\partial \bar{\mu}} = -\bar{\mathcal{N}}(\bar{\mu}, \bar{T}) = -N \text{ et } \frac{\partial \bar{\Omega}}{\partial \bar{T}} = -\bar{\mathcal{S}}(\bar{\mu}, \bar{T}) . \quad (10.3)$$

En injectant ces équations dans la relation (10.1) on obtient au premier ordre dans les fluctuations :

$$\bar{S}\bar{T} + \tilde{S}\bar{T} = E - \bar{\Omega}(\bar{\mu}, \bar{T}) - \bar{\mu}N - \tilde{\Omega}(\mu, T) . \quad (10.4)$$

La partie fluctuante de l'entropie est donc donnée par

$$\tilde{S} = -\tilde{\Omega}(\mu, T)/\bar{T} . \quad (10.5)$$

On utilise l'équivalent de la définition (5.4) pour la partie oscillante du grand potentiel. L'approche semiclassique nous donne l'expression de $\tilde{\Omega}$ dans le cas où la densité de niveaux à une particule est donnée par l'équation (2.1) :

$$\tilde{\Omega}(\mu, \beta) = -\frac{e^{\beta\mu}}{\beta} \sum_{op} \int_0^\infty A_{op}(\epsilon) \cos(S_{op}(\epsilon) + \nu_{op}) e^{-\beta\epsilon} d\epsilon . \quad (10.6)$$

Pour le moment il n'est pas possible d'aboutir à une formule plus explicite. Néanmoins on peut l'évaluer pour des systèmes particuliers.

Dans le cas de cavités, l'action du système est proportionnelle à $\sqrt{\epsilon}$ car les particules sont libres à l'intérieur du potentiel. Si en plus on suppose que A_{op} dépend d'une puissance de l'énergie, on pose alors :

$$S(\epsilon) = f_{op}\sqrt{\epsilon} + \nu_{op} \text{ et } A_{op}(\epsilon) = g_{op}\epsilon^s . \quad (10.7)$$

où f_{op} , g_{op} , ν_{op} et s sont des réels.

Ainsi on doit résoudre l'intégrale suivante pour chaque orbite :

$$I_{op}(\beta, s) = \int_0^\infty \epsilon^s \cos(f_{op}\sqrt{\epsilon} + \nu_{op}) e^{-\beta\epsilon} d\epsilon \quad (10.8)$$

$$= \frac{1}{\beta^{s+\frac{3}{2}}} \left[\Gamma(s+1) \cos(\nu_{op}) \sqrt{\beta} \mathcal{M}(s+1, \frac{1}{2}, \frac{-f_{op}^2}{4\beta}) - f_{op} \Gamma(s + \frac{3}{2}) \sin(\nu_{op}) \mathcal{M}(s + \frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{-f_{op}^2}{4\beta}) \right] . \quad (10.9)$$

\mathcal{M} est la fonction confluyente hypergéométrique de Kummer, lorsque x tend vers $+\infty$, $\mathcal{M}(a, b, -x) \propto x^{-a}$ [59].

On utilise cette dernière formule dans (10.9) et on obtient que $I_{op}(\beta, s)$ est une constante dépendant seulement des orbites périodiques du système. En utilisant (10.6), (7.22), (7.20) et (7.21) la partie oscillante de l'entropie dans la limite Maxwell-Boltzmann s'écrit alors

$$\tilde{S} \propto e^{\beta\mu} \propto N^{\nu+1} E^{-\nu} . \quad (10.10)$$

Ainsi dans le régime haute température la contribution de la partie oscillante du grand potentiel à la densité de niveaux donne une correction exponentielle non oscillante en puissance de N et de E pour des cavités. On peut montrer qu'il en est de même pour un oscillateur harmonique à trois dimensions. Or d'après le paragraphe §7.4 la densité de niveaux moyenne se comporte de manière polynomiale en énergie, la contribution de la partie oscillante est donc extrêmement faible. Ceci est à mettre en opposition au terme oscillant à basse température qui est, bien que d'un ordre inférieur, quant à lui beaucoup plus grand. A titre indicatif on donne :

$$\tilde{\mathcal{S}}(E, N) \propto \frac{N^{5/2}}{E^{3/2}} \text{ pour une cavité 3D } (\nu = 3/2) , \quad (10.11)$$

$$\tilde{\mathcal{S}}(E, N) \approx \frac{-63 N^5}{640 E^4} \text{ pour un ISO HO 3D .} \quad (10.12)$$

Chapitre 11

Partie oscillante à basse température : cas des bosons

On souhaite calculer la partie oscillante de l'entropie pour des bosons sans interaction à basse température plongés dans un potentiel champ moyen. La partie oscillante de l'entropie pour des bosons sans interaction à haute température a été calculée au chapitre 10. On pose $\hbar = m = 1$.

Pour des bosons, le nombre moyen d'occupation a une forme très différente comparée à celle des fermions. En effet il décroît exponentiellement avec l'énergie, on s'attend donc à avoir un lissage des fluctuations. L'équation (5.3) de l'entropie reste valable pour cette section. Son comportement dépend de l'énergie d'excitation du système. Or à température nulle toutes les particules se condensent au niveau fondamental. Il ne peut donc y avoir d'oscillations de l'énergie du fondamental en fonction du nombre de particules. Ainsi on peut utiliser le même raisonnement qu'au chapitre précédent et donner $\tilde{\mathcal{S}}$ par la formule (10.5). Il reste donc à calculer $\tilde{\Omega}$ pour des bosons.

En ne gardant que la partie oscillante de la densité de niveaux à une particule dans (5.4) on aboutit à :

$$\tilde{\Omega}(\mu, T) = T \int_0^\infty \tilde{\rho}(\epsilon) \ln \left(1 - e^{-\beta(\epsilon-\mu)} \right) d\epsilon . \quad (11.1)$$

Or la valeur du potentiel chimique dans le cas des bosons en fonction de la température est toujours négative (voir figure 5.1). On peut donc réécrire le nombre moyen d'occupations des bosons à une énergie ϵ comme

$$\frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\beta(\epsilon-\mu)} . \quad (11.2)$$

On utilise l'équation (2.1) dans (11.1) et on obtient :

$$\tilde{\Omega}(\mu, T) = T \int_0^\infty \sum_{op} A_{op}(\epsilon) \cos(S_{op}(\epsilon) + \nu_{op}) \ln \left(1 - e^{-\beta(\epsilon-\mu)} \right) d\epsilon . \quad (11.3)$$

Comme dans le chapitre précédent nous allons traiter des systèmes particuliers de bosons sans interaction dans un billard ou dans un potentiel harmonique 3D. Pour des bosons dans des cavités on utilise les conditions (10.7) pour $\tilde{\rho}$. En utilisant une intégration par partie sur (11.3) on a :

$$\tilde{\Omega}(\mu, T) = -2 \sum_{n=1}^\infty e^{n\beta\mu} \sum_{op} \frac{g_{op}}{f_{op}} \int_0^\infty \epsilon^{s+1/2} \sin(f_{op}\sqrt{\epsilon} + \nu_{op}) e^{-n\beta\epsilon} d\epsilon . \quad (11.4)$$

L'intégrale en ϵ est du même type que (10.8), on a donc :

$$I_{op}(\beta, s, n) = \int_0^\infty \epsilon^{s+1/2} \sin(f_{op}\sqrt{\epsilon} + \nu_{op}) e^{-n\beta\epsilon} d\epsilon \quad (11.5)$$

$$= \frac{1}{(n\beta)^{s+2}} \left[\Gamma\left(s + \frac{3}{2}\right) \sin(\nu_{op}) \sqrt{n\beta} \mathcal{M}\left(s + \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{-f_{op}^2}{4n\beta}\right) + f_{op} \Gamma(s+2) \cos(\nu_{op}) \mathcal{M}\left(s + 2, \frac{3}{2}, \frac{-f_{op}^2}{4\beta}\right) \right] . \quad (11.6)$$

Comme on s'intéresse au cas basse température, on a $e^{\beta\mu} \approx 1$ (voir paragraphe §7.1). De plus $\mathcal{M}(a, b, x) \approx 1$ [60]. On obtient pour $s > 0$ à l'ordre dominant en β :

$$I_{op}(\beta, s, n) = \frac{\Gamma\left(s + \frac{3}{2}\right) \sin(\nu_{op})}{(n\beta)^{s+3/2}} . \quad (11.7)$$

Et donc

$$\tilde{\Omega}(\mu, T) = -2 \frac{\Gamma(s+3/2)}{\beta^{s+3/2}} \sum_{n=1}^\infty \frac{e^{n\beta\mu}}{n^{s+3/2}} \sum_{op} \frac{g_{op} \sin(\nu_{op})}{f_{op}} \quad (11.8)$$

$$= \frac{-2\Gamma(s+3/2)\zeta(s+3/2)}{\beta^{s+3/2}} \sum_{op} \frac{g_{op} \sin(\nu_{op})}{f_{op}} . \quad (11.9)$$

A basse température, on remarque que $\tilde{\Omega}$ ne dépend que de la température. Pour un billard rectangulaire on a les paramètres suivants :

$$s = -1/4 , f_{op} = L_{i,j} , \nu_{op} = -\pi/4 \text{ et } g_{op} = \frac{2ab}{(2\pi)^{3/2} \sqrt{L_{i,j}}} . \quad (11.10)$$

Avec $L_{i,j} = 2\sqrt{a^2i^2 + b^2j^2}$ où $(i, j) \in \mathbb{N}^2 - (0, 0)$ et a, b sont les longueurs des cotés du rectangle. En utilisant ces dernières valeurs dans (11.9) on obtient :

$$\tilde{\Omega}(\mu, T) = \frac{ab\Gamma(\frac{5}{4})\zeta(\frac{5}{4})}{(2\pi)^{2/3}\beta^{5/4}} C_{a,b} , \quad (11.11)$$

où $C_{a,b} = \sum_{i,j=1}^{\infty} (a^2i^2 + b^2j^2)^{-3/4} + (a^{-3/2} + b^{-3/2})\zeta(3/2)$.

Pour des bosons sans interaction plongés dans un potentiel harmonique 3D isotrope on trouve, en utilisant la même méthode que pour la cavité mais pour une action linéaire en ϵ :

$$\tilde{\Omega}(\mu, T) = \frac{\pi^4}{60\beta^4} . \quad (11.12)$$

On utilise ces résultats dans (10.5). On obtient finalement une variation polynomiale en énergie à $\tilde{\mathcal{S}}$. Ce résultat n'est pas étonnant car le nombre moyen d'occupation pour les bosons décroît de manière lisse et rapide en fonction de l'énergie.

Néanmoins l'étude du cas de ISO HO 3D est intéressant car l'ordre de grandeur de $\tilde{\mathcal{S}}$ est le même que $\bar{\mathcal{S}}$. En effet $\bar{\mathcal{S}}$ est donnée par l'équation (7.9). On utilise (7.8) dans (11.12) et on trouve $\tilde{\mathcal{S}}/\bar{\mathcal{S}} = -3/16$. Le calcul de $\tilde{\mathcal{S}}$ peut donc malgré tout donner des indications plus précises sur la densité de niveaux.

Conclusion et Perspectives

Dans cette thèse, nous avons regardé diverses propriétés des gaz de Fermi. L'étude de la densité de niveaux nous a conduit à un traitement détaillé de l'énergie du fondamental pour des systèmes isolés. Grâce aux méthodes semiclassiques et grâce à la théorie des nombres, son comportement en fonction du nombre de particules et en fonction de la température a obtenu un fondement théorique plus solide.

Dans l'article [39], par le biais de la théorie de Thomas-Fermi et de la théorie des orbites périodiques, nous avons montré que pour un système canonique à potentiels fixes, le terme lisse de l'énergie provenant de la théorie de Thomas-Fermi n'est pas exactement la valeur moyenne de l'énergie du système. En effet la théorie de Thomas-Fermi s'applique seulement pour des systèmes grand canonique où le potentiel chimique est traité comme un paramètre libre. Pour avoir l'expression exacte de la valeur moyenne de l'énergie il faut tenir compte du terme oscillant de la densité de niveaux à une particule. On montre alors que celle-ci dépend du type intégrable ou chaotique de système. On montre aussi quels sont les effets des déformations sur cette moyenne.

Dans l'article [40], nous avons étudié plus particulièrement un système de fermions sans interaction plongés dans un potentiel harmonique à trois dimensions. Une étude détaillée en fonction du type de valeur des fréquences a été menée pour des potentiels fixes. Une variété importante de comportements pour l'énergie du fondamental a été trouvée. Ceux-ci dépendent des propriétés de théorie des nombres des valeurs des fréquences. On observe, suivant les cas, des comportements erratiques, réguliers, des effets de supercouches ou des effets de convergence de comportements des systèmes à basses symétries vers le cas ayant la symétrie maximale.

Nous avons obtenu une expression analytique de l'énergie du fondamental d'un système auto-cohérent. Nous avons aussi caractérisé dans les grandes lignes les propriétés de la valeur moyenne de l'énergie du fondamental d'un tel type de système.

Une importante partie de cette thèse a été consacrée à l'étude de la densité de niveaux pour des systèmes de fermions ou de bosons traités en champ moyen. Nous avons abordé différents points de vue sur cette quantité.

Nous avons discuté des termes correctifs dus aux effets de nombre fini de particules pour ρ_{MB} : alors que le cas de bosons est très riche [49], il semble que pour les fermions un seul type de comportement apparaît (voir chapitre 8).

Dans l'article [5], nous avons proposé une expression semiclassique de la densité de niveaux appliquée au noyau atomique. Celle-ci est composée de deux parties distinctes : une partie lisse provenant de la méthode standard de transformée de Laplace inverse avec des termes correctifs dus aux premiers termes du développement de l'expression exacte du nombre de partition pour deux types de particules, et d'une partie oscillante issue de la prise en compte des fluctuations de la densité de niveaux à une particule. Une étude numérique pour valider notre modèle a été menée au paragraphe §9.3. Dans le cas du noyau atomique, la partie oscillante de ρ_{MB} est contrôlée par un facteur de température qui dépend de la dynamique du système (chaotique ou intégrable) et par la partie oscillante de l'énergie du système. Dans une version simplifiée de notre modèle nous retrouvons la formule phénoménologique standard [56] du paramètre a .

L'homologue bosonique de la partie oscillante de ρ_{MB} à basse température a été discuté pour des billards et pour le ISO HO 3D. Nous montrons qu'il n'y a plus d'oscillation en fonction du nombre de particules, mais seulement une correction polynomiale. Dans le cas ISO HO 3D, ces corrections sont de l'ordre de la partie lisse. De même, dans la limite haute température où les deux types de statistiques se rejoignent, nous montrons que la partie oscillante de ρ_{MB} est exponentiellement négligeable comparée au terme lisse.

Néanmoins il est clair que les modèles proposés sont assez simples, et que de nombreuses améliorations restent à faire. On sait maintenant que l'énergie du fondamental est une quantité essentielle pour étudier ρ_{MB} , un effort sur cette grandeur est donc à faire. Notamment on sait que le manque de précision des valeurs des nombres magiques dans [40] est corrigé en ajoutant un terme d'interaction spin-orbit dans l'hamiltonien. Une expression analytique de ces valeurs, en utilisant la théorie des orbites périodiques, est certainement à notre portée.

De plus des travaux sur des interactions de type delta entre particules dans un potentiel champ moyen harmonique semblent indiquer une appartenance de phénomènes de super-couches [61]. Or on sait que ces super-couches sont absentes du modèle auto-cohérent de [40] alors qu'elles existent dans les noyaux atomiques [55]. Si on souhaite avoir une modélisation analytique plus réaliste

des systèmes auto-cohérents de gaz de Fermi il semble donc nécessaire d'y incorporer ces différentes interactions.

Une étude numérique pour des systèmes auto-cohérents équivalente à celle du paragraphe §9.3 pour des potentiels fixes doit aussi être menée avec une discussion plus fine de la partie moyenne de $\tilde{\mathcal{S}}$. Notamment, une étude générale du rapport entre les termes correctifs de la partie lisse de l'entropie provenant de la théorie des partitions et la moyenne de la partie oscillante en fonction de la symétrie du système reste à faire.

En outre, les calculs semiclassiques dans [9] donnent un cadre très général de ρ_{MB} en incluant directement les interactions entre particules et en utilisant les mêmes concepts que ceux de la première partie de la thèse. Néanmoins la complexité des formules trouvées en réduisent pour l'instant le champ d'application. Un pont entre ces formules et celles que nous proposons reste donc à construire.

Enfin les conclusions du paragraphe §8.2 doivent être confirmées en étudiant par exemple la relation entre le résultat (8.13) et la distribution des particules excitées pour des fermions.

Annexes

Annexe A

Calcul de $p_2(n)$

On souhaite calculer la densité de niveaux pour un oscillateur harmonique à une dimension de fréquence unité et pour deux types de particules à une énergie n , $p_2(n)$ lorsque le nombre de particules est grand par rapport à l'énergie. Pour un type de particules, nous avons remarqué au chapitre 6 que la densité de niveaux est égale au nombre de partitions p . Une formule analytique a été trouvée par Hardy et Ramanujan [45], nous nous allons adapter la démonstration proposée dans [44] pour calculer $p_2(n)$.

On a :

$$p_2(n) = \sum_{j=0}^n p(j)p(n-j) , \quad (\text{A.1})$$

où $p(j)$ est le nombre de partitions de j . La fonction génératrice de $p_2(n)$ est :

$$\mathcal{P}_2(x) = \sum_{j=0}^{\infty} p_2(j)x^j = \mathcal{P}^2(x) , \quad (\text{A.2})$$

où $\mathcal{P}(x)$ est la fonction génératrice de $p(j)$.

D'après [62] on a :

$$\mathcal{P}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} p(n)x^n = \prod_{n=1}^{\infty} (1 - q^n)^{-1} . \quad (\text{A.3})$$

En suivant la démonstration de $p(n)$ dans [44], on a :

$$\mathcal{P}_2(\exp(2\pi i(h+iz)/k)) = \omega_{h,k}^2 z \exp[2\pi(z^{-1}-z)/12k] \mathcal{P}^2(\exp[2\pi i(h'+iz^{-1})/k]) , \quad (\text{A.4})$$

où $\Re e(z) > 0$. h' est solution de la congruence

$$hh' \equiv -1(\text{mod } k) , \quad (\text{A.5})$$

et $\omega_{h,k}$ est la $24^{\text{ème}}$ racine de l'unité.

$$\omega_{h,k} = \exp(\pi i s(h, k)) \text{ avec } s(h, k) = \sum_{\mu=0}^{k-1} \left(\left(\frac{\mu}{k} \right) \right) \left(\left(\frac{h\mu}{k} \right) \right). \quad (\text{A.6})$$

Avec

$$((x)) = \begin{cases} x - [x] - 1/2 & \text{si } x \in \mathbb{R}/\mathbb{Z} \\ 0 & \text{si } x \in \mathbb{Z}, \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

où dans ce dernier système seulement $[x]$ indique la partie entière de x .

Nous utilisons maintenant la méthode développée par Hardy et Ramanujan pour calculer $p(n)$. Cette méthode est appelée la méthode du cercle. Elle est valable pour des séries dont le rayon de convergence est fini. En utilisant le théorème des résidus, on a :

$$p_2(n) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\mathcal{P}^2(x)}{x^{n+1}} dx. \quad (\text{A.8})$$

où le contour est un cercle centré sur l'origine et à l'intérieur du cercle unité. On fera tendre à la fin le rayon du cercle à 1. D'après (A.2) et (A.4), chaque

produit partiel de \mathcal{P}_2 , $\prod_{n=1}^N (1 - x^n)^{-2}$ a un pôle d'ordre $[2N]$ pour $x = 1$, un pôle d'ordre $[N]$ pour $x = -1$, un pôle d'ordre $[2N/3]$ pour $x = \exp(2\pi i/3)$, etc. Ainsi il est naturel de diviser le cercle en segments séparant chaque pôle. On effectue le changement de variable $x \rightarrow \rho \exp(2\pi i\phi)$ dans l'intégrale (A.8). On choisit de découper le cercle de rayon ρ en segments centrés sur les points rationnels $\rho \exp(2\pi i h/k)$ où h/k appartient à un certain ensemble de fractions. Sans entrer dans les détails de la manière la plus efficace de découper le cercle on aboutit à :

$$p_2(n) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\mathcal{P}^2(x)}{x^{n+1}} dx \quad (\text{A.9})$$

$$= \rho^{-n} \int_0^1 \mathcal{P}^2[\rho \exp(2\pi i\phi)] \exp(-2\pi i n\phi) d\phi \quad (\text{A.10})$$

$$= \rho^{-n} \sum_{\prime} \int_{-\theta'_{h,k}}^{\theta''_{h,k}} \mathcal{P}^2 \left[\rho \exp \left(\frac{2\pi i h}{k} + 2\pi i\phi \right) \right] \exp \left(-\frac{2\pi i n h}{k} - 2\pi i n\phi \right) d\phi. \quad (\text{A.11})$$

Avec \sum_{\prime} égale à la somme sur $1 \leq k \leq N$ et sur $0 \leq h < k$ et tel que h et k soient premiers entre eux. $\theta'_{h,k}$ et $\theta''_{h,k}$ sont des fractions combinants h et k . On pose

$$\rho = \exp \left(-\frac{2\pi}{N^2} \right) \text{ et } z = k(N^2 - i\phi). \quad (\text{A.12})$$

En utilisant les expressions (A.4), (A.12) dans (A.9) et en remplaçant $\mathcal{P}^2(x)$ par $1 + (\mathcal{P}^2(x) - 1)$, on obtient :

$$p_2(n) = \Sigma_1 + \Sigma_2 \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} &= \exp\left(\frac{2\pi n}{N^2}\right) \sum_i \exp\left(-\frac{2\pi i h n}{k}\right) \omega_{h,k}^2 \int_{-\theta'_{h,k}}^{\theta''_{h,k}} z \exp\left[\pi \frac{(z^{-1} - z)}{6} - 2\pi i n \phi\right] d\phi \\ &+ \exp\left(\frac{2\pi n}{N^2}\right) \sum_i \exp\left(-\frac{2\pi i h n}{k}\right) \omega_{h,k}^2 \int_{-\theta'_{h,k}}^{\theta''_{h,k}} z \exp\left[\pi \frac{(z^{-1} - z)}{6}\right] \\ &\times \left(\mathcal{P}^2 \exp\left(\left[2\pi i \frac{(h + iz^{-1})}{k}\right]\right) - 1\right) \exp(-2\pi n \phi) d\phi . \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

La suite consistera à démontrer que le terme Σ_1 est l'estimation principale de $p_2(n)$, alors que Σ_2 y contribue de manière négligeable.

Afin d'éviter une annexe trop importante nous ne détaillerons pas les calculs intermédiaires, ces derniers étant largement commentés dans [44]. En utilisant des majorations sur z dans \mathcal{P}^2 , cela mène à :

$$|\Sigma_2| \leq CN^{-1} \exp\left(\frac{2\pi n}{N^2}\right) . \quad (\text{A.15})$$

C est une constante indépendante de N . Ainsi pour $N \rightarrow \infty$, $\Sigma_2 \rightarrow 0$. Il nous reste donc à évaluer Σ_1 .

Posons d'abord $\omega = N^{-2} - i\phi$, l'intégrale (A.13) s'écrit alors :

$$ki^{-1} \exp(-2\pi n N^2) I_{h,k} \equiv \int_{N^{-2} + i\theta'_{h,k}}^{N^{-2} - i\theta''_{h,k}} g(\omega) d\omega , \quad (\text{A.16})$$

avec

$$g(\omega) = \omega \exp\left[2\pi \left(n - \frac{1}{12}\right) \omega + \frac{\pi}{6k^2 \omega}\right] . \quad (\text{A.17})$$

L'intégrand de cette dernière intégrale est mono-valué et analytique dans le plan complexe (pour ω). On utilise alors le théorème des résidus sur le contour représenté en figure A, avec $0 < \epsilon < n^{-2}$:

$$ki^{-1} \exp(-2\pi n N^2) I_{h,k} = L_0 - L_1 - L_2 - L_3 - L_4 - L_5 - L_6 . \quad (\text{A.18})$$

Où les L_j sont les intégrales $\int g(\omega) d\omega$ le long du contour C_j . On peut montrer que les intégrales sur les chemins 2,3,4,5 sont négligeables. Les intégrales sur les contours 1 et 6 mènent à

$$L_1 + L_6 = -2i \int_{\epsilon}^{\infty} t \exp\left[-2\pi \left(n - \frac{1}{12}\right) t - \frac{\pi}{6k^2 t}\right] = -2i H_k . \quad (\text{A.19})$$

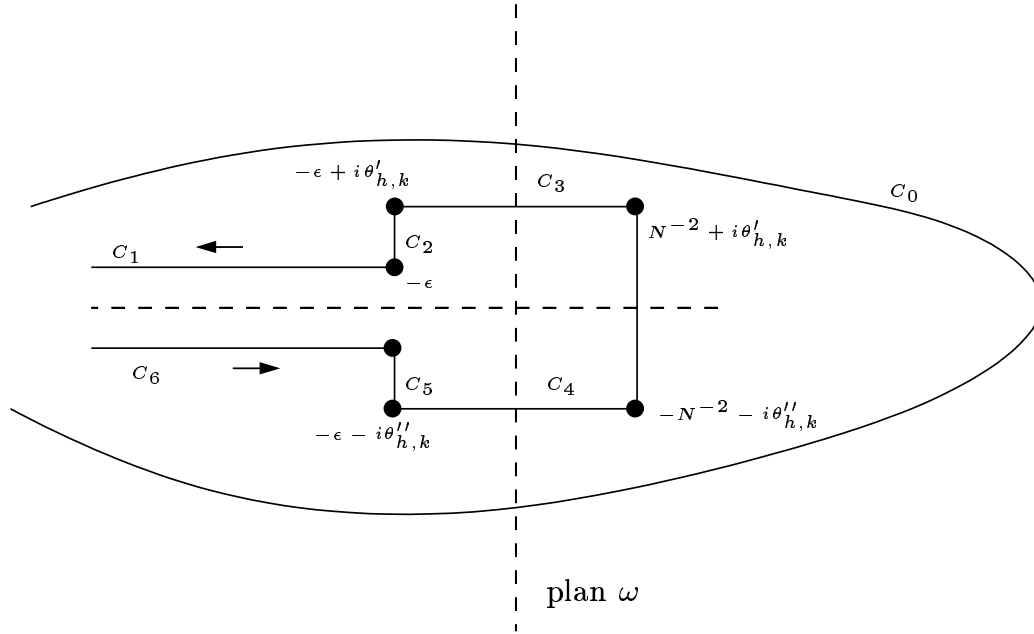


FIG. A.1 – Contour d'intégration dans le plan complexe de ω utilisé pour calculer l'intégrale $I_{h,k}$.

La dernière intégrale se calcule comme suit :

$$\frac{1}{i}L_0 = \frac{1}{i} \int_{C_0} \omega \exp \left[\frac{\pi}{6k^2\omega} + 2\pi \left(n - \frac{1}{12} \right) \omega \right] d\omega \quad (\text{A.20})$$

$$= \frac{1}{i} \int_{C_0} \omega \exp \left[2\pi \left(n - \frac{1}{12} \right) \omega \right] \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(\pi/6k^2\omega)^s}{s!} d\omega \quad (\text{A.21})$$

$$= 2\pi \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(\pi/6k^2\omega)^s}{s!} \left[2\pi \left(n - \frac{1}{12} \right) \right]^{s-2} \frac{1}{2\pi i} \int_{C_0} z^{1-s} e^z dz \quad (\text{A.22})$$

$$= \frac{1}{12} \left(n - \frac{1}{12} \right)^{-2} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{[\pi^2(n - 1/12)/3k^2]^s}{s! \Gamma(s-1)}. \quad (\text{A.23})$$

Cette équation provient de la formule de l'intégrale de contour de Hankel pour la fonction gamma réciproque

$$\frac{1}{\Gamma(s-1)} = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_0} z^{1-s} e^z dz. \quad (\text{A.24})$$

On pose alors $\psi_{2,k} = k(L_0 + 2H_k)$. Les expressions L_0 et de H_k sont tabulées dans [60]. En utilisant l'expression (A.13), on obtient à l'ordre dominant en

N la formule finale :

$$p_2(n) = \sum_{k=1}^{\infty} \mathcal{A}_{2,k} \psi_{2,k}(n) , \quad (\text{A.25})$$

avec $\mathcal{A}_{2,k} = \sum \omega_{h,k}^2 \exp(-2\pi inh/k)$ et

$$\psi_{2,k}(n) = \frac{2\pi}{k(12n-1)} \mathcal{I}_2(\pi\sqrt{12n-1}/3k) + \frac{4}{k(12n-1)} \mathcal{K}_2(\pi\sqrt{12n-1}/3k) . \quad (\text{A.26})$$

\mathcal{I}_2 et \mathcal{K}_2 sont les fonctions de Bessel modifiées. Elles se comportent asymptotiquement comme :

$$\mathcal{I}_2(x) = \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}} \left(1 - \frac{15}{8x} + \frac{105}{128x^2} + \mathcal{O}(x^{-3}) \right) \text{ et } \mathcal{K}_2(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \left(1 + \frac{15}{8x} + \frac{105}{128x^2} + \mathcal{O}(x^{-3}) \right) . \quad (\text{A.27})$$

En remplaçant ces développements dans l'expression (A.25) avec $k = 1$ et $\mathcal{A}_{2,1} = 1$, on obtient la formule (9.51).

Annexe B

Etude du spectre de l'oscillateur harmonique 3D

Dans l'article [40] nous démontrons que pour des rapports de fréquences rationnels, l'énergie du fondamental, pour un système de fermions sans interaction plongés dans un potentiel harmonique 3D, possède un comportement isotrope lorsque le nombre de particules est suffisamment grand.

La démonstration est faite à l'aide de la théorie des orbites périodiques. Néanmoins il est possible de retrouver le même comportement à partir de méthodes mathématiques issues de la théorie des nombres.

Dans le cas de rapports rationnels, on peut toujours réécrire les fréquences comme des entiers moyennant un changement de variables trivial. Ainsi on considère le spectre d'énergie de la forme :

$$E_{n_1, n_2, n_3} = Q_1 n_1 + Q_2 n_2 + Q_3 n_3 . \quad (\text{B.1})$$

Avec Q_1 , Q_2 et Q_3 sont des entiers strictement positifs correspondant aux fréquences de l'oscillateur harmonique premiers entre eux. n_1 , n_2 et n_3 sont des entiers positifs ou nuls ($\hbar = m = 1$). Sans modifier les résultats qui vont suivre nous avons déplacé l'origine des énergies à zéro. Nous allons calculer la dégénérescence $g(M)$ d'un niveau qui a pour énergie un entier M .

Soit la fonction génératrice de $g(M)$:

$$P(X) = \sum_{M=0}^{\infty} g(M) X^M = \sum_{n_1=0}^{\infty} X^{Q_1 n_1} \times \sum_{n_2=0}^{\infty} X^{Q_2 n_2} \times \sum_{n_3=0}^{\infty} X^{Q_3 n_3} . \quad (\text{B.2})$$

Pour $X < 1$ on a alors :

$$P(X) = \frac{1}{1 - X^{Q_1}} \times \frac{1}{1 - X^{Q_2}} \times \frac{1}{1 - X^{Q_3}} . \quad (\text{B.3})$$

116 Chapitre B. Etude du spectre de l'oscillateur harmonique 3D

Pour évaluer $g(M)$, on utilise le théorème de résidus sur $P(X)$:

$$g(M) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{P(X)}{X^{M+1}} dX . \quad (\text{B.4})$$

D'après l'expression (B.3), $P(X)$ possède des pôles sur le cercle de rayon 1 et centré à l'origine. Le contour est donc centré autour de ceux-ci. On remplace (B.3) dans (B.4), on aboutit alors à :

$$g(M) = \sum_{\substack{j_k=0,\dots,Q_k-1 \\ k'=1,2,3}} \text{Res} \left(\frac{1}{X^{M+1}(X-1)^3} \times \prod_{\substack{j'_{k'}=1,\dots,Q_{k'}-1 \\ k'=1,2,3}} \frac{1}{(X-\omega_{j'_{k'}})}, \omega_{j_k} \right) , \quad (\text{B.5})$$

où $\text{Res}(f(x), a)$ est le résidu de f en a et $\omega_{j_k} = \exp(2i\pi j/Q_k)$.
Or pour un pôle d'ordre n on a :

$$\text{Res}(f(x), a) = \frac{1}{(n-1)!} \lim_{x \rightarrow a} \frac{\partial^{n-1}}{\partial x^{n-1}} (x-a)^n f(x) . \quad (\text{B.6})$$

On voit qu'en général les résidus évalués aux différentes racines de l'unité vont donner des contributions constantes à $g(M)$ car ce sont des pôles simples. Néanmoins quelque soient les valeurs du triplet de fréquences, $P(X)$ possède un unique pôle triple en 1. En utilisant la formule (B.6), on remarque que la contribution dominante en M à g est donnée par le pôle triple. Ainsi pour M grand, on a $g(M)$ de la forme :

$$g(M) \underset{M \rightarrow \infty}{\approx} C g_{ISO}(M) , \quad (\text{B.7})$$

Avec $C = \prod_{\substack{j_k=1,\dots,Q_k-1 \\ k=1,2,3}} (1-\omega_{j_k})^{-1}$ et $g_{ISO}(M)$ est la dégénérescence du niveau

d'énergie M pour l'oscillateur harmonique isotrope 3D ayant pour fréquence principale l'unité.

Or pour un entier Q , on a :

$$\prod_{k=1}^{Q-1} (1 - e^{\frac{2i\pi k}{Q}}) = \prod_{k=1}^{Q-1} e^{\frac{i\pi k}{Q}} (e^{-\frac{i\pi k}{Q}} - e^{\frac{i\pi k}{Q}}) \quad (\text{B.8})$$

$$= (-2i)^{Q-1} \exp\left(\frac{i\pi}{Q} \sum_{k=1}^{Q-1} k\right) \prod_{k=1}^{Q-1} \sin\left(\frac{\pi k}{Q}\right) \quad (\text{B.9})$$

$$= Q . \quad (\text{B.10})$$

Pour la dernière égalité on a utilisé la formule $\prod_{k=1}^n \sin\left(\frac{k}{n+1}\right) = \frac{n+1}{2^n}$. On insère ce dernier résultat dans (B.7) et on trouve :

$$g(M) \underset{M \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{Q_1 Q_2 Q_3} g_{ISO}(M) . \quad (\text{B.11})$$

La densité de niveaux du système pour une énergie grande se comporte comme la densité de niveaux pour le cas isotrope mais diminuée d'un facteur $(Q_1 Q_2 Q_3)^{-1}$. Comme l'amplitude de la partie oscillante de l'énergie du système croît comme $N^{2/3}$, celle-ci sera diminuée d'un facteur $(Q_1 Q_2 Q_3)^{-1/3}$ par rapport au cas isotrope. Le résultat est bien cohérent avec ceux de l'article [40] (cf. la section III.C).

Annexe C

$\tilde{\mathcal{E}}(\mu, T)$ pour un gaz de fermions à basse température

Dans cette annexe, nous reprenons la démonstration de [57] pour déduire l'expression semiclassique de $\tilde{\mathcal{E}}(\mu, T)$ pour le régime basse température pour des fermions.

On a égalité entre la partie fluctuante de l'énergie et celle du grand potentiel $\tilde{\Omega}$ pour toutes températures [55, 63]. Ainsi il nous suffit de calculer l'expression de $\tilde{\Omega}$.

On utilise l'équivalent de la définition (5.4) pour la partie oscillante du grand potentiel et après intégration par partie on obtient :

$$\tilde{\Omega}(\mu, T) = -T \int_0^\infty \tilde{\rho}(\epsilon) \ln \left[1 + e^{(\mu-\epsilon)/T} \right] d\epsilon \quad (\text{C.1})$$

$$= - \int_0^\infty \tilde{\mathcal{N}}(\epsilon) f(\epsilon, \mu, T) d\epsilon . \quad (\text{C.2})$$

Avec $\tilde{\mathcal{N}}(\epsilon) = \int_0^\epsilon \tilde{\rho}(u) du$ et $f(\epsilon, \mu, T) = \frac{1}{1 + e^{(\epsilon-\mu)/T}}$.

On utilise l'équation (2.1) dans (C.2) et on aboutit à :

$$\tilde{\Omega}(\mu, T) = - \int_0^\infty \sum_{op} \frac{A_{op}(\epsilon)}{\tau_{op}(\epsilon)} \sin(S_{op}(\epsilon)/\hbar) f(\epsilon, \mu, T) d\epsilon . \quad (\text{C.3})$$

Nous avons omis l'indice de Maslov dans la densité de niveaux pour faciliter la lisibilité de la démonstration. Mais cela ne modifie pas sa généralité. Pour calculer $\tilde{\Omega}$ il suffit donc d'obtenir l'expression de l'intégrale $\int \frac{A_{op}(\epsilon)}{\tau_{op}(\epsilon)} \sin(S_{op}(\epsilon)/\hbar) f(\epsilon, \mu, T) d\epsilon$ pour chaque orbite.

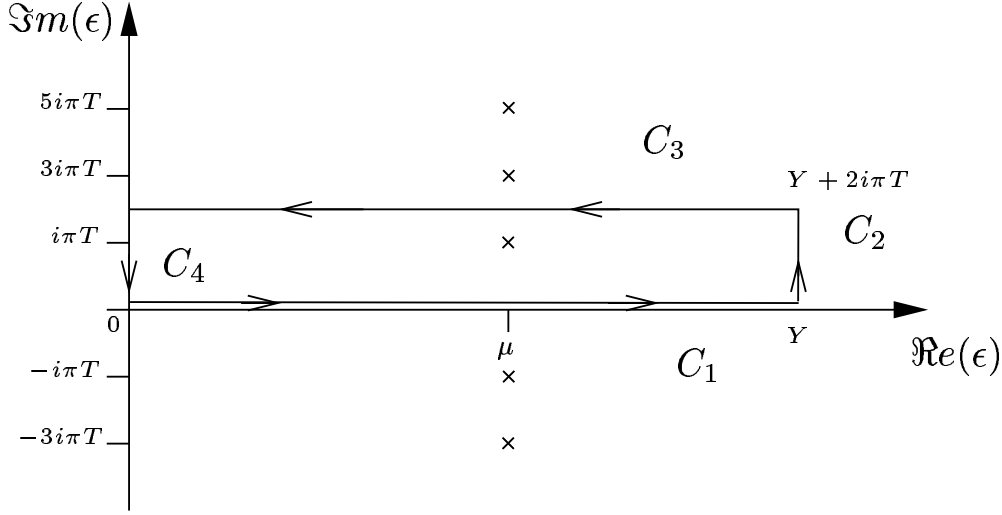


FIG. C.1 – Contour d'intégration dans le plan complexe de l'énergie ϵ utilisé pour calculer l'intégrale $I_{op}(\mu, T)$.

Le terme d'amplitude $\frac{A_{op}(\epsilon)}{\tau_{op}(\epsilon)}$ varie lentement par rapport au terme de phase. De plus nous verrons par la suite que la contribution principale de l'intégrale a lieu autour de la valeur de μ . Ainsi on considère le terme d'amplitude comme une constante évaluée à $\epsilon = \mu$.

Il nous reste donc à calculer l'intégrale suivante :

$$\int_0^\infty \sin(S_{op}(\epsilon)/\hbar) f(\epsilon, \mu, T) d\epsilon = \Im \left[\int_0^\infty e^{iS_{op}(\epsilon)/\hbar} f(\epsilon, \mu, T) d\epsilon \right]. \quad (C.4)$$

On effectue une intégration par parties de l'intégrale à l'intérieur de la partie imaginaire et on obtient :

$$\int_0^\infty e^{iS_{op}(\epsilon)/\hbar} f(\epsilon, \mu, T) d\epsilon = -\frac{i\hbar}{\tau_{op}(\epsilon)} \left[\left. e^{iS_{op}(\epsilon)/\hbar} f(\epsilon, \mu, T) \right|_0^\infty - \int_0^\infty f'(\epsilon, \mu, T) e^{iS_{op}(\epsilon)/\hbar} d\epsilon \right]. \quad (C.5)$$

Le premier terme de la partie droite de l'équation est nul : Pour $\epsilon = 0$ l'action du système est nulle et pour $\epsilon \rightarrow \infty$, la fonction f décroît exponentiellement.

Le grand potentiel se réécrit alors en

$$\tilde{\Omega}(\mu, T) = -\hbar \sum_{op} \frac{A_{op}(\mu)}{\tau_{op}^2(\mu)} \Re [I_{op}(\mu, T)], \quad (C.6)$$

avec $I_{op}(\mu, T) = \int e^{i(S_{op}(\epsilon)/\hbar + \nu_{op})} f'(\epsilon, \mu, T) d\epsilon$.

Or f' possède des pôles doubles en $\epsilon_k = \mu + i\pi(2k+1)T$ avec $k \in \mathbb{Z}^*$. Nous allons calculer l'intégrale le long du contour $C_1 + C_2 + C_3 + C_4$ (cf. figure C). Le formule de Cauchy nous donne alors :

$$\sum_{j=1}^4 \int_{C_j} e^{iS_{op}(\epsilon)/\hbar} f'(\epsilon, \mu, T) d\epsilon = 2i\pi \operatorname{Res} \left(e^{iS_{op}(\epsilon)/\hbar} f'(\epsilon, \mu, T), 2i\pi T \right), \quad (\text{C.7})$$

où $\operatorname{Res}(g(x), a)$ est le résidu de g en a .

Comme f' est très piquée autour de μ et pratiquement nulle pour $(\epsilon - \mu) > T$, l'intégrale sur les chemins C_2 et C_4 est nulle.

f' est $2\pi T$ -périodique, ainsi on a pour le chemin C_3 :

$$\int_{Y+2i\pi T}^{2i\pi T} e^{iS_{op}(\epsilon)/\hbar} f'(\epsilon, \mu, T) d\epsilon = - \int_0^Y e^{iS_{op}(\epsilon+2i\pi T)/\hbar} f'(\epsilon, \mu, T) d\epsilon. \quad (\text{C.8})$$

Or $S_{op}(\epsilon + 2i\pi T) = S_{op}(\epsilon) + 2i\pi T \tau_{op}(\epsilon)$, car pour le domaine de variation de ϵ , T est un petit paramètre. De plus comme le terme correctif est imaginaire pur, il va donner une contribution non oscillante à l'intégrale. Comme pour le cas de l'amplitude, le terme correctif est considéré comme une constante évaluée à $\epsilon = \mu$.

L'équation (C.7) nous donne alors :

$$I_{op}(\mu, T) \left(1 - e^{-2\pi\tau_{op}(\mu)T/\hbar} \right) = - \frac{\pi\tau_{op}(\mu)T}{\hbar} \exp \left(-2\pi\tau_{op}(\mu)T/\hbar + iS_{op}(\mu)/\hbar \right). \quad (\text{C.9})$$

On injecte l'équation précédente dans (C.6) et on obtient finalement l'équation (9.79) :

$$\tilde{\Omega}(\mu, T) = \hbar \sum_{op} \frac{A_{op}(\mu)}{\tau_{op}^2(\mu)} \kappa \left(\frac{\pi\tau_{op}(\mu)T}{\hbar} \right) \cos(S_{op}(\mu)), \quad (\text{C.10})$$

avec $\kappa(x) = x / \sinh(x)$.

Bibliographie

- [1] H. A. Bethe, Phys. Rev. **50**, 332 (1936).
- [2] A. Gilbert, A. G. W. Cameron, J. W. Truran, Can. J. Phys. **44**, 151 (1966); G. Michaud and W. A. Fowler, Phys. Rev. C **2**, 2041 (1970).
- [3] Handbook for calculation of nuclear reaction data RIPL-2, <http://www-nds.iaea.org/ripl-2>.
- [4] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure Vol.I* (Benjamin, Reading, Massachusetts, 1969).
- [5] P. Leboeuf, J. Roccia, Phys. Rev. Lett. **97**, 010401 (2006).
- [6] A. Gilbert, A. G. W. Cameron, Can. J. Phys. **43** 1446 (1965).
- [7] S. Goriely, F. Tondeur, J.M. Pearson, Atomic Data Nuclear Data Tables **77**, 311 (2001).
- [8] H. M. Sommermann and H. A. Weidenmüller, Europhys. Lett. **23**, 79 (1993).
- [9] H. A. Weidenmüller, Phys. Rev. A **48**, 1819 (1993); J. Sakhr and N. D. Whelan, Phys. Rev. E **67**, 066213 (2003).
- [10] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, Berlin, 1980).
- [11] H. P. Baltes and E. R. Hilf, *Spectra of Finite Systems*, (Bibliographisches Institut-Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1976).
- [12] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and quantum Mechanics*, (Springer, New York, 1990).
- [13] M. Brack and R. K. Bhaduri, *Semiclassical Physics* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1997).
- [14] IAEA Nuclear Data, <http://www-nds.iaea.org/ripl-2>.
- [15] V. M. Strutinsky, Nucl. Phys. **A95** 420 (1967); Nucl. Phys. **A122** 1 (1968).

-
- [16] E. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932); J. G. Kirkwood, Phys. Rev. **44**, 31 (1933).
- [17] G. E. Uhlenbeck and E. Beth, Physica **3**, 729 (1936).
- [18] B. K. Jennings, R. K. Bhaduri, and M. Brack. Nucl. Phys. **A253**, 29 (1975).
- [19] M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **12**, 343 (1971); M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer, New York, 1990).
- [20] R. Balian and C. Bloch, Ann. Phys. (N.Y.) **60**, 401 (1970); R. Balian and C. Bloch, Ann. Phys. (N.Y.) **64**, 271 (1971); R. Balian and C. Bloch, Ann. Phys. (N.Y.) **69**, 76 (1972); R. Balian and C. Bloch, Ann. Phys. (N.Y.) **84**, 559 (1974).
- [21] M. V. Berry, M. Tabor, J. Phys. **A 10**, 371 (1977).
- [22] M. Tabor, *Chaos integrability in nonlinear dynamics, an introduction* (Wiley-Interscience, 1989).
- [23] V.I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (Springer, 1989).
- [24] M. V. Berry, Proc. Roy. Soc. Lond. **A 400**, 229 (1985).
- [25] J. Hannay and A. M. Ozorio de Almeida, J. Phys. A **17**, 3429 (1984).
- [26] K. Richter and M. Sieber, Phys. Rev. Lett. **89**, 206801 (2002); S. Heusler, S. Müller, P. Braun, F. Haake, Phys. Rev. Lett. **96**, 066804 (2006); S. Heusler, S. Müller, P. Braun, F. Haake, J. Phys. A **39**, 159 (2006).
- [27] O. Bohigas, M.J. Giannoni, C. Schmit, Phys. Rev. Lett. **52**, 1 (1984) [SPIRES].
- [28] E.P. Wigner, SIAM Review **9**, 1 (1967).
- [29] F.J. Dyson, J. Math. Phys. **3**, 140 (1962).
- [30] M. L. Mehta, *Random Matrices* (Academic Press, London, second edition, 1991).
- [31] J. B. Gard, J. Rainwater, J. S. Petersen, W.W. Havens, Phys. Rev. **134**, B985 (1964).
- [32] C. F. von Weizsäcker, Z. Phys. **96**, 431 (1935).
- [33] G. Audi, A. H. Wapstra, and C. Thibault, Nucl. Phys. **A729**, 337 (2003).
- [34] P.M. Moller, J.R. Nix, W.D. Meyers, W.J. Swiatecki, At. Data Nucl. Data Tables **59**, 185 (1995).

- [35] S. G. Nilsson, Kgl. Dan. Videnŕ. Selsk. Mat. Fys. Medd. **29** No.16 (1955) 29.
- [36] O. Bohigas and P. Leboeuf, Phys. Rev. Lett. **88**, 092502 (2002).
- [37] H. Olofsson, S. Åberg, O. Bohigas, and P. Leboeuf, Phys. Rev. Lett. **96**, 042502 (2006).
- [38] M. Centelles, P. Schuck, and X. Viñas, Ann. Phys. **322**, 363 (2007).
- [39] M. Centelles, P. Leboeuf, A. Monastera, J. Roccia, P. Schuck and X. Viñas, Phys. Rev. C **74**, 034332 (2006).
- [40] J. Roccia, P. Leboeuf, Phys. Rev. C **76**, 014301 (2007).
- [41] A. Pandey, O. Bohigas, M. J. Giannoni, J. Phys. A **22**, 4083 (1989).
- [42] M. Brack, S. Jain, Phys. Rev. A **51**, 3462 (1995).
- [43] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet *Physique Statistique* (collection enseignement des sciences, Hermann, 2001).
- [44] G. E. Andrews, *The Theory of Partitions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998).
- [45] G. H. Hardy and S. Ramanujan, Proc. London Math. Soc. **17**, 75 (1918); H. Rademacher, Proc. London Math. Soc. **43**, 241 (1937).
- [46] P. Erdős and J. Lehner, Duke Math J. **8**, 335 (1941).
- [47] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Sauders College Publishing, USA, 1976).
- [48] P. Flageolet, Theor. Comp. Sci. **215**, 371 (1999).
- [49] A. Comtet, P. Leboeuf, Satya N. Majumdar, Phys. Rev. Lett. **98**, 070404 (2007).
- [50] S. Coles, *An introduction to statistical modeling of extreme values* (Springer, 2001).
- [51] T. M. Garoni, N. E. Frankel, M. L. Glasser, J. Math. Phys. **42**, 1860 (2001).
- [52] P. Leboeuf, A. G. Monastera, A. Relaño, Phys. Rev. Lett. **94**, 102502 (2005).
- [53] A. Jelovic, Phys. Rev. C **76**, 017301 (2007).
- [54] P. Leboeuf and A. G. Monastera, Ann. Phys. (NY) **297** 127 (2002).
- [55] P. Leboeuf, in *Lecture Note in Physics*, vol. 652, edited by J. M. Arias and M. Lozano (Springer-Verlag, Berlin, 2005).
- [56] A. V. Ignatyuk, G. N. Smirenkin, A.S. Tishin, Sov. J. Nucl. Phys. **21**, 255 (1975).

- [57] K. Richter, D. Ullmo, R. Jalabert, Phys. Rep. **276**, 1 (1996).
- [58] E. Mainegra, R. Capote, Comput. Phys. Commun. **150**, 43 (2003).
- [59] A. P. Prudnikov, Yu. A. Brychkov and O. I. Marichev, *Integrals and Series : Elementary functions, Vol. 1* (Gordon and Breach Science Publishers,1986).
- [60] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, 9th printing* (New York : Dover, 1972).
- [61] Y.Yu, M. Ogren, S. Aberg, S. M. Reimann, M. Brack, Phys. Rev. A **72**, 051602(R) (2005).
- [62] L. Euler, *Introductio in analysin infinitorum* (1748).
- [63] P. Meier, M. Brack, S. C. Creagh, Z. Phys. D **41**, 281 (1997).

Résumé

Nous étudions la densité de niveaux du problème à N -corps ρ_{MB} pour des gaz de fermions et de bosons. Nous établissons son comportement en fonction de la température et du nombre de particules. Nous avons discuté des termes correctifs dus aux effets de nombre fini de particules pour ρ_{MB} : alors que le cas des bosons est très riche, il semble qu'un seul type de comportement apparaisse pour des fermions. De plus nous proposons une expression semiclassique de la densité de niveaux pour deux types de particules ayant un moment angulaire. Celle-ci est composée de deux parties distinctes : une partie lisse provenant de la méthode standard du point de col avec des termes correctifs dus aux premiers termes du développement de l'expression exacte du nombre de partition pour deux types de particules, et d'une partie oscillante issue de la prise en compte des fluctuations de la densité de niveaux à une particule. Une étude numérique pour valider notre modèle a été menée. Dans le cas du noyau atomique, la partie oscillante de ρ_{MB} est contrôlée par un facteur de température qui dépend de la dynamique du système (chaotique ou intégrable) et par la partie oscillante de l'énergie du fondamental. Cela nous a conduit à traiter plus particulièrement cette dernière quantité : pour un système isolé, nous donnons l'expression générale de la valeur moyenne de l'énergie pour des potentiels fixes. Le cas auto-cohérent est abordé *via* l'exemple analytique de l'oscillateur harmonique à trois dimensions (HO 3D). L'homologue bosonique de la partie oscillante de ρ_{MB} à basse température a été discuté pour des billards et pour le HO 3D isotrope. Nous montrons qu'il n'y a plus d'oscillation en fonction du nombre de particules, mais seulement une correction polynomiale. Dans le cas de HO 3D isotrope, ces corrections sont de l'ordre de la partie lisse. De même, dans la limite haute température où les deux types de statistique se rejoignent, nous montrons que la partie oscillante de ρ_{MB} est exponentiellement négligeable comparée au terme lisse.

mots-clés : densité de niveaux du problème à N -corps, correction de couches de l'énergie du fondamental, théorie semiclassique, gaz de Fermi, théorie des nombres.

Abstract

We investigate the many-body level density ρ_{MB} for fermion and boson gases. We establish its behavior as a function of the temperature and the number of particles. We deal with correction terms due to finite number of particles effects for ρ_{MB} : for fermions, it seems that it exists only one behavior whereas the case of bosons. Besides we propose a semiclassical expression of ρ_{MB} for two types of particles with an angular momentum. It is decomposed into two different parts : a smooth part coming from the standard saddle point method plus corrective terms due to the expansion of the number of partitions for two types of particles and an oscillating part coming from the fluctuations of the single-particle level density. Our model is validated by a numerical study. For the case of the atomic nucleus, the oscillating part of ρ_{MB} is controlled by a temperature factor which depends on the chaotic or integrable nature of the system and depends on the fluctuation of the ground state energy. This leads to consider in more detail this last quantity. For an isolated system, we give the general expression of the mean value for fixed potentials. We treat the self-bound system case through the analytical example of the three dimensional harmonic oscillator (3D HO). Furthermore we study the oscillating part of ρ_{MB} for bosons in the low temperature regime for billiards and for isotropic 3D HO. We note the oscillations disappear leading to a polynomial correction. In the case of the isotropic 3D HO, these corrections have the same order of magnitude as the smooth part. In the same way, for the high temperature regime we show the oscillating part of ρ_{MB} is exponentially negligible compared to the smooth part.

keywords : many-body level density, shell correction ground state energy, semiclassical theory, Fermi gases, number theory.

Laboratoire de physique théorique et modèles statistiques-UMR 8626- Université Paris XI