

Fonctions de Corrélation et Fonctions de Mémoire
pour un système en équilibre thermodynamique (suite)

D - Notion de positivité.

(Dans ce §, A représente une seule variable et non un ensemble de r variables $A_1, \dots, A_r$)

① Buts de ce paragraphe

- Il s'agit d'étudier le signe de la transformée de Fourier $\mathcal{E}_{AA}(\omega)$ de la fonction d'autocorrelation $\mathcal{E}_{AA}(t)$ et de montrer qu'il est positif.
Pour les fonctions d'autocorrelation classiques, ce résultat découle du théorème de Wiener - Khintchine (voir page III-3). On peut donc dire que dans ce § on généralise un tel théorème à des systèmes quantiques.
- On pourrait démontrer ce résultat à partir de l'expression de $\mathcal{E}_{AA}(t)$ donnée par la théorie de Mori. En fait, il est beaucoup plus simple de revenir à l'expression de $\mathcal{E}_{AA}(\omega)$ [c.-à-d. soit de $K_{AA}(\omega)$, soit de $S_{AA}(\omega)$] en fonction de la fonction spectrale $\xi_{AA}(\omega)$. Une telle approche présente en plus l'intérêt de souligner le lien entre le caractère dissipatif d'un système en équilibre thermodynamique et la positivité de $\mathcal{E}_{AA}(\omega)$.
- Nous montrerons enfin que la théorie de Mori n'est pas le seul chemin possible pour arriver à la notion de fonction de mémoire et pour établir une équation intégral-différentielle du type de (IX-12) pour la fonction d'autocorrelation. Une autre méthode possible consiste à utiliser précisément la positivité (§ 3 ci-dessous). Evidemment, l'intérêt de la théorie de Mori est d'interpréter simplement la fonction de mémoire comme fonction de corrélation de la force de Langevin.

② Lien entre le caractère dissipatif du système et la positivité.

- Rappelons tout d'abord l'expression (V-18) de la fonction spectrale $\xi_{AA}(\omega)$ (rappelons qu'on suppose ici $A = A^\dagger$).

$$\xi_{AA}(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{n,q} (\pi_n - \pi_q) |A_{qn}|^2 \delta(\omega_{qn} - \omega) \quad (X-1)$$

Pour $\omega > 0$, on a forcément $\omega_{qn} = \omega > 0$ et par suite $E_q > E_n$.
Donc $\pi_n = e^{-\beta E_n} / Z$ est supérieur à $\pi_q = e^{-\beta E_q} / Z$ et, comme $|A_{qn}|^2 \geq 0$

$$\xi_{AA}(\omega) \geq 0 \quad \text{pour } \omega > 0 \quad (X-2)$$

On vérifie aussi aisément sur (X-1) que

$$\xi_{AA}(\omega) = - \xi_{AA}(-\omega) \quad (X-3)$$

- L'énergie absorbée par unité de temps par le système lorsqu'il est soumis à une perturbation en $a A \cos \omega t$ est, d'après (V-34) proportionnelle à $\frac{a^2}{2} \omega \xi_{AA}(\omega)$. Or, de (X-2) et (X-3) on déduit que

$$\omega \xi_{AA}(\omega) \geq 0 \quad (X-4)$$

Donc, un système en équilibre thermodynamique dirige toujours de l'énergie (ses niveaux sont d'autant plus peuplés qu'ils sont plus bas en énergie et les processus "d'absorption" l'emportent toujours sur les processus "d'émission induite").

- Revenons alors maintenant au tableau de la page VI-2. Les T.F. $K_{AA}(\omega)$ et $S_{AA}(\omega)$ des fonctions de corrélation canonique et symétrique sont égales à :

$$K_{AA}(\omega) = \frac{2}{\beta \omega} \xi_{AA}(\omega) \quad S_{AA}(\omega) = \hbar \coth \frac{\beta \hbar \omega}{2} \xi_{AA}(\omega) \quad (X-5)$$

Par comparaison avec les propriétés de $\xi_{AA}(\omega)$, on déduit alors immédiatement les points suivants :

- (i) Comme $\xi_{AA}(\omega)$ est une fonction réelle et impaire de ω [voir X-1 et X-3] et que $1/\omega$ et $\coth \beta \hbar \omega / 2$ sont des fonctions impaires et réelles, on a, en revenant à la notation $\mathcal{C}_{AA}(\omega)$ (commune pour les 2 fonctions de corrélation) :

$$\boxed{\mathcal{C}_{AA}(\omega) : \text{fonction paire et réelle de } \omega} \quad (X-6)$$

- (ii) Comme $1/\omega$ et $\coth \beta \hbar \omega / 2$ ont le même signe que ω , on déduit de X-4

$$\boxed{\mathcal{C}_{AA}(\omega) \geq 0} \quad (X-7)$$

ce qui montre bien le lien existant entre positivité et caractère dissipatif.

Il est donc bien justifié de désigner, comme nous le ferons désormais, $\mathcal{C}_{AA}(\omega)$ comme étant la densité spectrale de la grandeur physique A . -
Expérimentalement, les signaux observés sont très souvent des densités spectrales.

Remarque : Rappelons que les relations de réciprocity d'Onsager (VI-40), jointes à (X-5) permettent d'obtenir immédiatement :

$$\mathcal{C}_{AB}(\omega) = E_A E_B \mathcal{C}_{BA}(\omega) \quad (X-8)$$

où E_A et E_B sont les signatures par renversement du temps des observables A et B ($A = A^+$, $B = B^+$). La relation (X-8) est utile lorsqu'on s'intéresse à une corrélation "croisée" entre 2 grandeurs différentes A et B (plutôt qu'à une fonction d'auto-corrélation).

③ Disgression : comment pourrait-on arriver à la notion de fonction de mémoire en utilisant uniquement la positivité ? (en 1^{re} lecture.)

(Ce § n'est pas indispensable pour la suite du chapitre et peut être sauté)

Nous allons montrer que, si $C(\omega)$ est la transformée de Fourier - Laplace ^(T.F.L.) de $\tilde{C}(t)$ [pour simplifier l'écriture, on ne met pas les indices AA], la positivité de $C(\omega)$ permet d'écrire $C(\omega)$ sous la forme :

$$C(\omega) = \frac{\langle A | A \rangle}{-i\omega + M(\omega)} \quad (X-9)$$

où $M(\omega)$ est la T.F.L. d'une fonction $\tilde{M}(t)$ ayant les mêmes propriétés que $\tilde{C}(t)$ [$M(\omega) \geq 0$]. L'équation intégrodifférentielle (IX-12) en résulte alors. (avec $\Omega = 0$)

(i) Conséquences de la causalité

- $C(\omega)$ est la T.F. de la fonction causale $\tilde{C}(t) = \theta(t) \tilde{C}(t)$ [cf IX-30] produit de $\theta(t)$ par $\tilde{C}(t)$. Par T.F. on obtient donc un produit de convolution

$$C(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int d\omega' \frac{C(\omega')}{\omega' - \omega - i\epsilon} \quad (X-10)$$

- le fait que $\tilde{C}(t)$ soit nul pour $t < 0$ permet d'ailleurs de passer aux ω complexes. L'intégrale

$$\hat{C}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{izt} \tilde{C}(t) dt = \int_0^{\infty} e^{izt} \tilde{C}(t) dt \quad (X-11)$$

existe pour $\text{Im} z > 0$ et permet d'introduire une fonction $\hat{C}(z)$ de z analytique dans le $1/2$ plan supérieur. On démontre aisément à partir

de (X-11) [en faisant apparaître la T.F. de $\tilde{C}(t)$] que :

X-3

pour $\text{Im } z > 0$
$$\hat{C}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int d\omega' \frac{C(\omega')}{\omega' - z} \quad (X-12)$$

et que par suite

$$C(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \hat{C}(\omega + i\epsilon) \quad (X-13)$$

— L'expression (X-12) permet d'ailleurs de définir $\hat{C}(z)$ non seulement pour $\text{Im } z > 0$ mais aussi pour $\text{Im } z < 0$, c-à-d dans tout le plan complexe coupé (sauf l'axe réel). On vérifie alors immédiatement à partir de (X-12) que

$$\hat{C}(-z) = -\hat{C}(z) \quad [\hat{C}(z)]^* = \hat{C}(z^*) \quad (X-14)$$

(ii) Conséquences de la positivité

— De (X-12) il découle que [$C(\omega')$ étant réel] :

$$\text{Re } \hat{C}(z) = \frac{1}{2\pi} \text{Im } z \int d\omega' \frac{C(\omega')}{|\omega' - z|^2} \quad (X-15)$$

Comme $C(\omega')$ n'est jamais négatif, on en déduit que

$$\text{Re } \hat{C}(z) \text{ a le même signe que } \text{Im } z \quad (X-16)$$

De plus, comme $\int d\omega' \frac{C(\omega')}{|\omega' - z|^2}$ ne peut s'annuler^(*) jamais, on voit que $\text{Re } \hat{C}(z)$ ne peut s'annuler en dehors de l'axe réel. Il en donc de même de $\hat{C}(z)$ et on peut par suite écrire

$$\hat{C}(z) = \frac{1}{\hat{D}(z)} \quad (X-17)$$

où $\hat{D}(z)$ est, comme $\hat{C}(z)$, une fonction analytique en dehors de l'axe réel et impaire.

— Quelle est la limite de $\hat{C}(z)$ pour $z \rightarrow \infty$ en dehors de l'axe réel ?
D'après X-12

$$\hat{C}(z) \xrightarrow[z \rightarrow \infty \text{ en dehors de l'axe réel}]{} -\frac{1}{2\pi i} \frac{1}{z} \int d\omega' C(\omega') = \frac{\tilde{C}(0)}{-iz} = \frac{\langle A|A \rangle}{-iz} \quad (X-18)$$

On peut donc réécrire (X-17) sous la forme

$$\hat{C}(z) = \frac{\langle A|A \rangle}{-iz + \hat{M}(z)} \quad (X-19)$$

où $\hat{M}(z)$, qui est impaire comme $\hat{C}(z)$, tend vers 0 pour $z \rightarrow \infty$.

— De (X-19), on déduit aisément

$$\text{Re } \hat{M}(z) = \text{Im } z + \frac{\langle A|A \rangle}{|\hat{C}(z)|^2} \text{Re } \hat{C}(z) \quad (X-20)$$

D'après (X-16), $\text{Re } \hat{M}(z)$ a, comme $\text{Re } \hat{C}(z)$ le signe de $\text{Im } z$. Finalement, il est possible d'écrire $\hat{C}(z)$ sous la forme (X-19) où $\hat{M}(z)$ a les mêmes propriétés : parité, analyticit , positivit  que $\hat{C}(z)$

— En passant   la limite $z \rightarrow \omega + i\epsilon$, on obtient alors

(X-9) ou $M(\omega)$ est, comme $C(\omega)$, la T.F.L. d'une fonction $M(t)$ qui n'est autre que la fonction de m moire

(*) En effet, l'int grale sur ω' ne peut s'annuler que si $C(\omega') = 0 \quad \forall \omega'$.
Or $\int d\omega' C(\omega') = 2\pi \tilde{C}(0) = 2\pi \langle A|A \rangle \neq 0$ si $A \neq 0$

Dans ce §, nous exposons une méthode de construction graphique de $\mathcal{C}(\omega)$ à partir de la T.F.L. $M(\omega)$ de la fonction de mémoire $M(t)$ [Nous considérons une seule variable A , avec $A = A^+$, et omettons, pour simplifier l'écriture, les indices AA]. Une telle construction permettra, dans les §§ suivants de simplifier les discussions. Nous étudierons aussi les moments de $\mathcal{C}(\omega)$ et $M(\omega)$.

① Établissement de la formule reliant $\mathcal{C}(\omega)$ à $M(\omega)$.

- Partons de l'équation fondamentale (IX-36) reliant $\mathcal{C}(\omega)$ [et non $\mathcal{C}(\omega)$] à $M(\omega)$.

- De (X-6) on déduit aisément que $\tilde{E}(t) = \langle A | e^{i\Omega t} | A \rangle$ est une fonction paire et réelle de t . Donc le coefficient de it dans le développement de $\tilde{E}(t)$ en puissances de it est nul :

$$\langle A | \mathcal{L} | A \rangle = 0 \quad (X-21)$$

On peut par suite faire $\Omega = 0$ dans l'équation (IX-36) qui devient

$$\mathcal{C}(\omega) = \frac{\langle A | A \rangle}{-i\omega + M(\omega)} \quad (X-22)$$

- Comme $\tilde{E}(t)$ est une fonction paire et réelle de t et que $\mathcal{C}(\omega)$ est la T.F.L. de $\tilde{E}(t)$, on a :

$$\mathcal{C}(\omega) = 2 \operatorname{Re} \mathcal{C}(\omega) \quad (X-23)$$

c-à-d, si l'on introduit les parties réelle et imaginaire de $M(\omega)$

$$M(\omega) = M'(\omega) + i M''(\omega) \quad (X-24)$$

$$\mathcal{C}(\omega) = \frac{2 \langle A | A \rangle M'(\omega)}{[\omega - M''(\omega)]^2 + [M'(\omega)]^2} \quad (X-25)$$

- D'après (X-23) et (X-6), la partie réelle de $\mathcal{C}(\omega)$ est paire. Donc la partie imaginaire de $\mathcal{C}(\omega)$ qui lui est reliée par une relation de dispersion est impaire. On montre alors aisément à partir de (X-22) que $M'(\omega)$ est pair, et $M''(\omega)$ impair.

Enfin $M'(\omega)$ et $M''(\omega)$ sont eux-mêmes liés par des relations de dispersion puisque $M(\omega)$ est une T.F.L. Donc [voir III-40] :

$$M''(\omega) = -\frac{i}{\pi} \mathcal{P} \int d\omega' \frac{M'(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (X-26)$$

- Finalement, on voit qu'on peut exprimer $\mathcal{C}(\omega)$ en fonction de la seule fonction paire $M'(\omega)$

$$\mathcal{C}(\omega) = 2 \langle A | A \rangle \frac{M'(\omega)}{\left[\omega - \frac{i}{\pi} \mathcal{P} \int d\omega' \frac{M'(\omega')}{\omega' - \omega} \right]^2 + [M'(\omega)]^2} \quad (X-27)$$

Remarque : On peut aisément montrer à partir de (IX-10) que, dans le cas d'une seule variable A (telle que $A = A^+$), $\tilde{M}(t)$ est une fonction paire et réelle de t [il faut utiliser notamment V-55 et la propriété correspondante pour la fonction de corrélation symétrique].

Donc, puisque on a ici $\Omega = 0$, toutes les fonctions apparaissant dans l'équation intégrodifférentielle (IX-12) sont réelles et paires.

Enfin, la T.F. $M(\omega)$ de $\tilde{M}(t)$ est elle aussi paire et réelle et $M(\omega)$ n'est autre que $2 M'(\omega)$.

② Construction graphique (voir figure 1)

X-5

- On dessine la courbe $M'(w)$ qui est une fonction paire de w , et qui pour w suffisamment grand doit tendre très vite vers 0 puisque, comme nous le verrons plus loin, tous les moments de $M'(w)$ existent.
- On en déduit la courbe $M''(w)$ [voir formule X-26] qui est une fonction impaire de w . Si $M'(w)$ a une forme de courbe d'absorption, $M''(w)$ a une forme de courbe de dispersion. Pour w très grand, $M''(w)$ décroît en $1/w$.
- On dessine la droite de pente 1 passant par l'origine.
- Pour avoir la valeur $\mathcal{E}(w_0)$ de $\mathcal{E}(w)$ en $w = w_0$, on construit la verticale d'abscisse w_0 qui coupe les 3 courbes $M'(w)$, $M''(w)$ et la droite de pente 1 en α, β, γ respectivement et l'axe des w en δ . On a alors :

$$\mathcal{E}(w_0) = 2\langle A|A \rangle \frac{\alpha \delta}{(\beta \gamma)^2 + (\alpha \delta)^2} \quad (X-28)$$

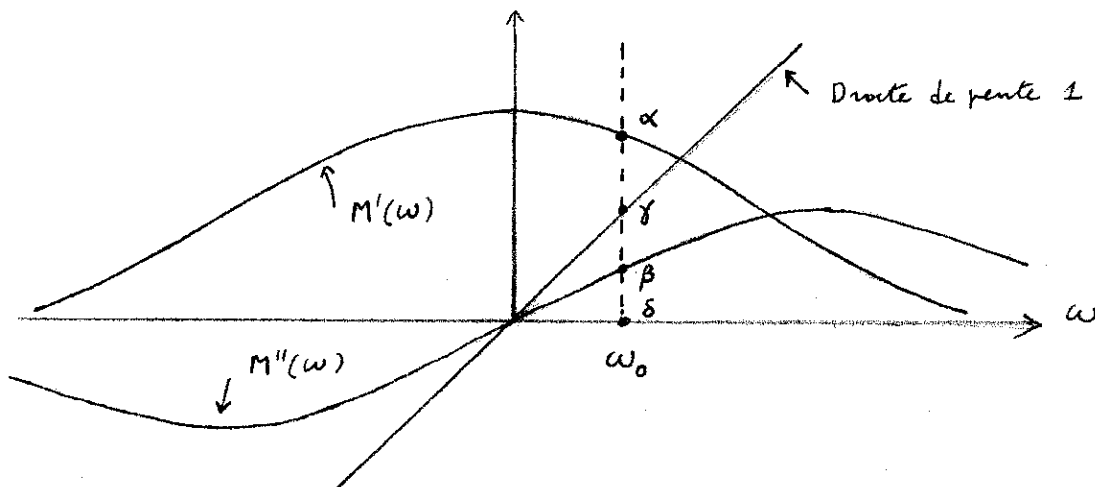


Figure 1

③ Moments γ_{2n} de la densité spectrale $\mathcal{E}(w)$

- Pour caractériser la manière dont $\mathcal{E}(w)$ tend vers 0 quand $w \rightarrow \pm\infty$, il est intéressant de calculer les moments de $\mathcal{E}(w)$ qui, par suite de la parité de $\mathcal{E}(w)$, ne peuvent être que pairs. Posons

$$\gamma_{2n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} w^{2n} \mathcal{E}(w) dw \quad (X-29)$$

- A partir de la relation (IX-34) entre $\mathcal{E}(w)$ et $\tilde{\mathcal{E}}(t)$, on obtient alors :

$$\begin{aligned} \gamma_{2n} &= (-1)^n \frac{d^{2n}}{dt^{2n}} \tilde{\mathcal{E}}(t) \Big|_{t=0} = (-1)^n \frac{d^{2n}}{dt^{2n}} \langle A | e^{i\mathcal{L}t} | A \rangle \Big|_{t=0} \\ &= \langle (i\mathcal{L})^{2n} A | (i\mathcal{L})^{2n} A \rangle \end{aligned} \quad (X-30)$$

c.à-d comme $i\mathcal{L}A = \dot{A}$, $(i\mathcal{L})^2 A = \ddot{A}$, $(i\mathcal{L})^3 A = \ddot{\dot{A}}$...

$$\gamma_0 = \langle A | A \rangle, \quad \gamma_2 = \langle \dot{A} | \dot{A} \rangle, \quad \gamma_4 = \langle \ddot{A} | \ddot{A} \rangle, \quad \gamma_6 = \langle \ddot{\dot{A}} | \ddot{\dot{A}} \rangle \dots \quad (X-31)$$

- En particulier, on obtient pour le comportement de $\tilde{\mathcal{E}}(t)$ aux temps courts :

$$\tilde{\mathcal{E}}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \gamma_{2n} \frac{t^{2n}}{(2n)!} = \langle A | A \rangle - \langle \dot{A} | \dot{A} \rangle \frac{t^2}{2!} + \langle \ddot{A} | \ddot{A} \rangle \frac{t^4}{4!} + \dots \quad (X-32)$$

④ Moments μ_{2n} de la fonction mémoire - lien entre μ_{2n} et γ_{2n} X-6

- Le principe du calcul est le même. D'après la parité de M [voir la remarque au bas de la page X-4], seuls les moments pairs sont non nuls

$$\mu_{2n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^{2n} M(\omega) d\omega \quad (X-33)$$

- On obtient alors d'après (IX-10) :

$$\mu_{2n} = (-1)^n \frac{d^{2n}}{dt^{2n}} \tilde{M}(t) \Big|_{t=0} = (-1)^n \langle A|A \rangle^{-1} \frac{d^{2n}}{dt^{2n}} \langle i\varphi|A|e^{i\varphi} \varphi^t|i\varphi|A \rangle \Big|_{t=0} \quad (X-34)$$

Comme d'après (X-21), $\langle A|\varphi|A \rangle = 0$, $P\varphi|A \rangle \simeq |A \rangle \langle A|\varphi|A \rangle = 0$ et on peut donc écrire $\varphi\varphi|A \rangle = (P+\varphi)\varphi|A \rangle = \varphi|A \rangle$, de sorte que (X-34) s'écrit finalement

$$\mu_{2n} = \frac{\langle A|\varphi^n \varphi^n|A \rangle}{\langle A|A \rangle} = \frac{\langle \ddot{A} | (\varphi\varphi)^{2n} | \ddot{A} \rangle}{\langle A|A \rangle} \quad (X-35)$$

- Calcul des premiers moments μ

$$\boxed{\mu_0} \quad \mu_0 = \frac{\langle \ddot{A} | \ddot{A} \rangle}{\langle A|A \rangle} \quad (X-36)$$

$$\boxed{\mu_2} \quad \mu_2 = \langle \ddot{A} | \varphi\varphi\varphi\varphi | \ddot{A} \rangle / \langle A|A \rangle \quad (X-37)$$

Montrons que $\varphi|\ddot{A} \rangle = |\ddot{A} \rangle$. En effet, $P|\ddot{A} \rangle \simeq |A \rangle \langle A|\ddot{A} \rangle = |A \rangle \langle A|\varphi\varphi|A \rangle = 0$. Donc :

$$\begin{aligned} \mu_2 &= \frac{1}{\langle A|A \rangle} \langle \ddot{A} | (1 - \frac{|A \rangle \langle A|}{\langle A|A \rangle}) \varphi\varphi | \ddot{A} \rangle \\ &= \frac{\langle \ddot{A} | \ddot{A} \rangle}{\langle A|A \rangle} - \left(\frac{\langle \ddot{A} | \ddot{A} \rangle}{\langle A|A \rangle} \right)^2 \end{aligned} \quad (X-38)$$

$$\begin{aligned} \boxed{\mu_4} \quad \mu_4 &= \langle \ddot{A} | \varphi\varphi\varphi\varphi\varphi\varphi\varphi | \ddot{A} \rangle / \langle A|A \rangle \\ &= \langle \ddot{A} | \varphi\varphi\varphi\varphi | \ddot{A} \rangle / \langle A|A \rangle \\ &= \frac{1}{\langle A|A \rangle} \langle \ddot{A} | (1 - \frac{|A \rangle \langle A|}{\langle A|A \rangle}) \varphi\varphi (1 - \frac{|A \rangle \langle A|}{\langle A|A \rangle}) \varphi\varphi (1 - \frac{|A \rangle \langle A|}{\langle A|A \rangle}) | \ddot{A} \rangle \end{aligned} \quad (X-39)$$

Un calcul sans difficultés donne à partir de (X-39)

$$\mu_4 = \frac{\langle \ddot{A} | \ddot{A} \rangle}{\langle A|A \rangle} - 2 \frac{\langle \ddot{A} | \ddot{A} \rangle \langle \ddot{A} | \ddot{A} \rangle}{(\langle A|A \rangle)^2} + \left(\frac{\langle \ddot{A} | \ddot{A} \rangle}{\langle A|A \rangle} \right)^3 \quad (X-40)$$

- Comparaison entre les μ et les γ . En utilisant (X-32), on obtient aisément

$$\begin{cases} \mu_0 = \frac{\gamma_2}{\gamma_0} \\ \mu_2 = \frac{\gamma_4}{\gamma_0} - \left(\frac{\gamma_2}{\gamma_0} \right)^2 \\ \mu_4 = \frac{\gamma_6}{\gamma_0} - \frac{2\gamma_2\gamma_4}{\gamma_0^2} + \left(\frac{\gamma_2}{\gamma_0} \right)^3 \end{cases} \quad (X-41)$$

Le moment μ_{2n} est donc relié à tous les moments χ_{2p} avec $0 \leq p \leq n+1$.

X-7

⑤ Calcul des coefficients Δ^2 apparaissant dans le développement en fractions continues de $C(w)$

- D'après (IX-42), (IX-46) et (IX-51)

$$|f_0\rangle = |A\rangle \quad (X-42)$$

$$|f_1\rangle = i\varphi \mathcal{L}|A\rangle = |\dot{A}\rangle \quad (X-43)$$

car, comme nous l'avons vu plus haut, $\varphi|A\rangle = |\dot{A}\rangle$

$$|f_2\rangle = (i)^2(1-P_0-P_1)\mathcal{L}(1-P_0)\mathcal{L}|A\rangle$$

$$= (i)^2(1-P_0-P_1)\mathcal{L}^2|A\rangle$$

$$= \left(1 - \frac{|A\rangle\langle A|}{\langle A|A\rangle} - \frac{|\dot{A}\rangle\langle \dot{A}|}{\langle \dot{A}|\dot{A}\rangle}\right)|\ddot{A}\rangle$$

$$= |\ddot{A}\rangle - |A\rangle \frac{\langle A|\ddot{A}\rangle}{\langle A|A\rangle} \quad (X-44)$$

$$(\text{car } \langle \dot{A}|\ddot{A}\rangle = i\langle \dot{A}|\mathcal{L}|A\rangle = 0)$$

- On déduit alors de (IX-57) et (IX-67)

$$\Delta_1^2 = \frac{\langle f_1|f_1\rangle}{\langle f_0|f_0\rangle} = \frac{\langle \dot{A}|\dot{A}\rangle}{\langle A|A\rangle} \quad (X-45)$$

$$\begin{aligned} \Delta_2^2 &= \frac{\langle f_2|f_2\rangle}{\langle f_1|f_1\rangle} = \frac{\langle \ddot{A}|\ddot{A}\rangle - \frac{|\langle A|\ddot{A}\rangle|^2}{\langle A|A\rangle}}{\langle \dot{A}|\dot{A}\rangle} \\ &= \frac{\langle \ddot{A}|\ddot{A}\rangle}{\langle \dot{A}|\dot{A}\rangle} - \frac{\langle \dot{A}|\ddot{A}\rangle}{\langle A|A\rangle} \end{aligned} \quad (X-46)$$

$$(\text{car } \langle A|\ddot{A}\rangle = \langle A|(i\mathcal{L})^2 A\rangle = -\langle \dot{A}|\dot{A}\rangle)$$

Et ainsi de suite ...

- On peut enfin exprimer $\Delta_1^2, \Delta_2^2, \dots$ en fonction des μ .

En comparant (X-45), (X-46) avec (X-36), (X-38), on obtient en effet

$$\Delta_1^2 = \mu_0 \quad (X-47)$$

$$\Delta_2^2 = \frac{\mu_2}{\mu_0} \quad (X-48)$$

- Ces diverses formules nous seront utiles plus loin pour construire des "modèles" de fonctions mémoires.