REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE YAHIA FARES DE MEDEA



Faculté des Sciences

Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de :

Master

Filière : Physique
Spécialité : Physique théorique

Thème

La solution Exacte de l'équation De Schrödinger pour certains potentiels

---

Présenté par :

AISSAT Noureddine

BOUHALA Hamza

Juillet 2021

Devant le jury :

Dr BOUCHACHIA. K	MCB	Président	UYFM
Dr CHERROUD .O	MCB	Examinateur	UYFM
Dr AMROUCHE. A	MCB	Examinatrice	UYFM
Mme HATTOU. S	MAA	Promotrice	UYFM

REMERCIEMENTS

Nous remercions Dieu le tout puissant de nous avoir donné le courage, la santé, la patience jusqu'à l'achèvement de ce mémoire.

Nous tenons, avant tout, à exprimer nos profondes gratitudes à

Mme: Hattou Souad, notre promotrice. Nous la remercions pour sa gentillesse et sa disponibilité, nous avons eu le grand plaisir de travailler sous sa direction. Nos remerciements à tous les membres de jury ;Dr Bouchachia , Dr Cherroud et Dr Amrouche ; qui ont accepté de juger ce travail et d'y apporter leurs cautions. Nos remerciements vont aussi à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin a la concrétisation de ce travail pour leurs conseils, leurs encouragements et leurs soutiens.

DEDICACES

Nous remercions le Bon-Dieu pour nous avoir donné la force d'accomplir ce travail pour aller plus loin InChaa Allah. Nous dédions ce travail à nos parents, pour leurs encouragements et leurs aides, et soutien et surtout les sacrifices qu'ils ont fait pour nous voir réussir. Nous le dédions aussi à nos frères et sœurs A toute la grande Famille Aissat et Bouhalla ;à tous les amis et nos professeurs sans exception A tous ceux et celles qui nous ont aidé et encouragé de près comme de loin . A tous les enseignants de département de Physique à l'université de Médéa.

AISSAT Noureddine

BOUHALA Hamza

*T*able des matières

Introduction 1

Chapitre I : L'équation de Schrödinger indépendant du temps

2-Construction de l'équation de Schrödinger.....4

2.1-Naissance de l'équation (contexte historique) ……..……. 4

3-La fonction d'onde 6

4-Solution de l'équation de Schrödinger.....7

4.2-L'équation de Schrödinger stationnaire.....7

4.2.1-L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension.....8

4.2.2-L'équation de Schrödinger stationnaire à deux dimensions ….....9

4.2.3-L'équation de Schrödinger stationnaire à trois dimensions 10

a- La séparation des variables 10

5-Les méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire 11

5. 1-Méthodes numériques 11

5.2-Méthodes analytiques 11

5.2.1- la méthode de perturbation 11

a- La résolution de l'équation de perturbation aux valeurs propres de.H (λ)……..……..12

b-La correction d'énergie 13

b .1 - La correction au vecteur propre…..……..14

5.2-2- la méthode variationnelle 14

a -Principe de la méthode 14

Chapitre II : La Solution de l'équation de Schrödinger non stationnaire

2-Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger non stationnaire 17

2.1. Méthodes approximatives 17

2.2 -Méthodes exactes 17

2.2.1-Transformations unitaires.....17

2.2.2- L'opérateur d'évolution.....17

2.2.3-Changement de représentation.....19

2.2.4- La théorie des invariants 19

3- Les invariants 20

3-1- Propriétés de l'invariant 20

a- Valeurs propres de l'invariant I 21

b- Les vecteurs propres de I.....23

c-Solution générale 23

Chapitre III : Solution de l'équation de Schrödinger stationnaire et non stationnaire pour le potentiel de Morse :

1-la solution non stationnaire…….……25

1.2- Le potentiel de Morse ....……25

1.3-La méthode (N-U) 28

1.4-L'énergie 32

1.5-La fonction d'onde.....32

2- la solution stationnaire……...……33

2.2Méthode de changement de variable à une dimension……..…….33

2.3Méthode directe via les polynômes de laguerre…….…..…….……..35

2.4 Les états propres……...…….36

Chapitre IV : la Solution de l'équation de Schrödinger stationnaire et non stationnaire pour le potentiel de Pösch-Teller

1. La solution stationnaire……...……39

2-l'équation de Schrödinger.....39

2-1-La solution de l'équation de Schrödinger stationnaire.....39

2-1-1- La Méthode (N-U) 40

a- spectre d'énergie 44

b- La fonction d'onde 44

2-2-la solution de l'équation de Schrödinger non stationnaire 45

a- Le spectre d'énergie 47

b-La fonction d'onde 47

Références bibliographiques

Références bibliographique.....50

Introduction

Introduction

L'équation de Schrödinger en mécanique quantique joue le même rôle que l'équation de Newton en mécanique classique. Elle est très importante, d'autant plus qu'elle régit l'évolution temporelle et spatio-temporelle du système, et que sa solution aide davantage dans son étude, et c'est par l'accès à la fonction d'onde qui contient toutes les informations sur les particules du système, et donc la description du phénomène physique par la mécanique quantique.

Depuis la publication des travaux de Schrödinger [1], les physiciens théoriciens l'ont fait Chercher à trouver des solutions à l'équation de Schrödinger pour différents systèmes physiques en utilisant plusieurs méthodes, qu'elles soient analytiques ou numériques.

Dans le cas des systèmes stationnaires, nous séparons les variables et obtenons l'équation de Schrödinger stationnaire, qui a été résolue analytiquement, mais n'est valable que pour certains systèmes simples. Ce qui n'est pas utilisable pour l'hamiltonien dépendant du temps, c'est-à-dire le cas non stationnaire, et pour lequel on peut avoir recours à de nombreuses autres méthodes comme les méthodes exactes ou les méthodes approximatives pour la solution de l'équation de Schrödinger, telles que la méthode d'invariant [2], la méthode de perturbation [3], l'approximation adiabatique, et l'approximation soudaine [3].

Dans ce mémoire, on va résoudre l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse ainsi le potentiel de Pösch-Teller stationnaire et non stationnaire.

Le premier est un modèle pratique d'énergie potentielle pour une molécule diatomique [4]. Il représente une meilleure approximation pour la structure vibrationnelle de la molécule que celle de l'oscillateur harmonique quantique car il comprend de manière explicite les effets d'une rupture de liaison, comme l'existence des états non liés. Il prend aussi en compte l'anharmonicité des liaisons réelles et la probabilité non nulle de transition pour les états harmoniques et les bandes de combinaison.

Pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps, on utilise la méthode de séparation de variables et la méthode (N-U) [5], on obtiendra le spectre d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes en termes du polynôme de Laguerre.

Concernant le potentiel de Pösch-Teller, c'est un potentiel qui décrit la vibration moléculaire diatomique, pour le résoudre dans un cas stationnaire on applique la méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U) [5] pour réduire l'équation différentielle du deuxième degré à une équation différentielle de type hypergéométrique. Enfin, on obtiendra la forme finale des fonctions d'onde en termes de polynôme de Jacobi.

Alors que pour le cas non stationnaire on utilise la méthode de séparation de variables et la méthode (N-U), on obtiendra les fonctions d'onde correspondantes aussi en termes du polynôme de Jacobi.

Notre mémoire est subdivisé en quatre chapitres :

Le premier chapitre est consacré à l'équation de Schrödinger stationnaire (indépendante du temps) avec ses méthodes de solution.

Dans le deuxième chapitre on présente l'équation de Schrödinger non stationnaire (dépendante du temps) avec les méthodes de solution.

Dans le chapitre trois, on détaille les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire et non stationnaire pour le potentiel de Morse, et à la fin dans le quatrième chapitre on détaille les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire et non stationnaire pour le potentiel hyperbolique.

Chapitre I

Solution de l'équation de Schrödinger Stationnaire

L’´équation de Schrödinger :

1-Introduction :

L’équation de Schrödinger joue un rôle fondamental en mécanique quantique non relativiste, le même rôle que l'équation newtonienne en mécanique classique par exemple, elle décrit l'évolution temporelle et spatiale de l'état d'un objet quantique représenté par la fonction d'onde [6].

2-Construction de l’équation de Schrödinger :

2.1-Naissance de l’équation (contexte historique) :

Le 19ème siècle a connu l’apparition de l’une des deux grandes théories physiques du siècle ; la physique quantique. Tout au début de la mécanique quantique on a été confronté au problème de l’explication des états discrets d’un atome. En mécanique classique l’état d’un système physique est donné par la résolution des équations du mouvement du système. Par contre, en mécanique quantique l’état du système est déterminé par la résolution de l’équation de Schrödinger. Cette équation a été proposée par E. Schrödinger en 1926. De Broglie et Schrödinger ont ainsi pu développer un parallélisme entre la mécanique classique et l'optique et parvenir à la conception de la mécanique ondulatoire [7]

L'équation de Schrödinger, trouvée par le physicien Erwin Schrödinger en 1925, est une équation d'onde qui généralise l'approche de De Broglie ci-dessus aux particules massives non-relativistes soumises à une force dérivant d'une énergie potentielle. Le physicien autrichien Erwin Schrödinger utilisa les résultats de De Broglie pour établir une équation régissant l’évolution spatiale et temporelle de la fonction d’onde d’un système physique. Pour obtenir l’équation de Schrödinger prenons la formule de l’onde plane de De Broglie :

$$\Psi(\vec{r},t) = Ae^{\mathrm{i}(\vec{\mathrm{k}}\vec{\mathrm{r}}-\omega \mathrm{t})} \qquad \text{(I-1)}$$

Ou ω :est la pulsation et k : est un vecteur d’onde

Dans la suite il sera plus intéressant de considérer la pulsation ω et le nombre d’onde k , qui d’après les postulats ci-dessus, sont liés à la particule classique par :

$$E = \hbar\,\omega \qquad \text{(I-2)}$$

$$\vec{P} = \hbar\,\vec{K} \qquad \text{(I-3)}$$

Alors

$$\Psi(\vec{r},t\,) = \Psi_0 e^{\mathrm{i}(\vec{\mathrm{p}}\vec{\mathrm{r}}-\mathrm{Et})} \tag{I-4}$$

Lorsqu'on dérive l'onde par rapport au temps, il devient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t\,) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,E\Psi_0 e^{\mathrm{i}(\vec{\mathrm{p}}\vec{\mathrm{r}}-\mathrm{Et})} = -\frac{i}{\hbar}E\,\Psi(\vec{r},t\,) \tag{I-5}$$

$$E\,\Psi(\vec{r},t\,) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t\,) \tag{I-6}$$

Alors :

$$\hat{\mathrm{E}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{I-7}$$

Ê: l'opérateur d'énergie

En dérivant l'onde par rapport au l'espace, il vient :

$$\vec{\nabla}\,\Psi(\vec{r},t\,) = \frac{i}{\hbar}pA\,e^{\mathrm{i}(\vec{\mathrm{p}}\vec{\mathrm{r}}-\mathrm{Et})} = \frac{i}{\hbar}p\Psi(\vec{r},t\,) \tag{I-8}$$

D' où

$$\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \tag{I-9}$$

$\hat{p}$: L'opérateur d'impulsion

Avec :

$$\vec{\nabla}= \vec{\imath}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{\jmath}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z} \tag{I-10}$$

On mécanique classique l'énergie mécanique de particule libre est donné par :

$$T = \frac{p^2}{2m} \tag{I-11}$$

Cette quantité apparait dans la formulation hamiltonienne pour une particule libre $V(\vec{r}) = 0$ de la mécanique classique.

En appliquant le principe de correspondance entre les valeurs classiques et quantiques, pour l'énergie, de l'équation (I-11) et (I-6) on obtient :

$$\frac{p^2}{2m}\,\Psi(\vec{r},t\,) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t\,) \tag{I-12}$$

Et pour l'impulsion :

$$\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \tag{I-13}$$

$$\frac{p^2}{2m}\,\Psi(\vec{r},t\,) = \frac{1}{2m} - i\hbar\vec{\nabla}\,\Psi(\vec{r},t\,) \tag{I-14}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi(\vec{r},t) \quad \text{(I-15)}$$

Donc l'équation de Schrödinger devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\ \Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) \quad \text{(I-16)}$$

Où : $\vec{\nabla}^2 = \Delta$ est le Laplacien.

L'opérateur hamiltonien du système pour une particule libre s'écrit :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad \text{(I-17)}$$

En utilisant cet opérateur, on peut simplifier l'écriture de l'équation de Schrödinger, on obtient:

$$\hat{H}\,\Psi(\vec{r},t) = E\,\Psi(\vec{r},t) \quad \text{(I-18)}$$

Lorsque la particule est plongée dans un potentiel scalaire V(r) (par exemple le potentiel d'un oscillateur harmonique) d'après la mécanique classique, l'énergie totale du système s'écrit comme suit:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad \text{(I-19)}$$

Avec cette nouvelle valeur d'énergie et à partir de l'énergie (I-7) et l'opérateur d'impulsion, l'équation de Schrödinger devient :

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial t}\ \Psi(\vec{r},t) = [-\hbar^2\Delta + V(r)\,]\,\Psi(\vec{r},t) \quad \text{(I-20)}$$

L'énergie totale ce n'est que l'opérateur Hamiltonien du système :

$$\mathrm{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \quad \text{(I-21)}$$

l'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial t} = H\Psi(\vec{r},t) \quad \text{(I-22)}$$

3- La fonction d'onde :

On peut considérer la fonction d'onde parmi les postulats quantiques qui décrivent l'état d'un système. C'est les solutions de l'équation de Schrödinger, qui porte toutes les informations relatives à ce système

La fonction d'onde $\Psi(\vec{r},t)$ doit satisfaire les conditions suivant:

- Elle doit être continue pour $\vec{r}$.
- La dérivée $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ doit être continue, ces contraints sont appliquées sous condition de la limite sur les solutions.
- Elle doit être normalisée. Cela implique que la fonction d'onde en approche à zéro comme x approche à l'infinité c'est-à-dire :

$$\int \Psi^* \, \Psi d^3r = \int |\Psi|^2 \, d^3r = 1 \qquad \text{(I-23)}$$

Si $\Psi(\vec{r},t)$ est normé

$$P=\int |\Psi|^2 \, d^3r = 1 \qquad \text{(I-24)}$$

Avec $|\Psi(\vec{r},t)|$ est la densité de probabilité.

4-Solution de l'équation de Schrödinger *:*

4.1- Introduction :

Les physiciens théoriciens se sont penchés à trouver des solutions à partir de plusieurs méthodes mathématiques pour résoudre l'équation de Schrödinger : Soit analytique ou numérique. L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la mécanique quantique. Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles qui décrit l'évolution au cours du temps de la fonction d'onde d'un système physique [6]. C'est une équation difficile à résoudre pour la plupart de systèmes quantiques. Il existe deux types d'équations de Schrödinger : l'équation de Schrödinger indépendante du temps et l'équation de Schrödinger dépendante du temps [8].

4.2- L'équation de Schrödinger stationnaire :

L'équation de Schrödinger est appelée stationnaire si l'hamiltonien du système physique non dépendant du temps, où l'énergie totale est conservée et les solutions particulière sont de la forme :

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \, \varphi(\vec{r}) \qquad \text{(I-25)}$$

Où E : l'énergie, et φ r satisfait l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})\right]\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \qquad \text{(I-26)}$$

Avec : $p = -i\,\hbar\vec{\nabla}$

Où $\vec{\nabla}$: L'opérateur de dérivés partielle ou coordonnées cartésiennes et défini par :

$$\vec{\nabla}= \vec{\imath}\frac{\partial}{\partial x}+\vec{\jmath}\frac{\partial}{\partial y}+\vec{k}\frac{\partial}{\partial z} \quad \text{(I-27)}$$

4.2.1 -L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension

Schrödinger stationnaire à une dimension Dans ce cas le potentiel dépend d'une seule dimension, et l'équation de Schrödinger s'écrit comme suit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2+V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) \quad \text{(I-28)}$$

A cette mémoire, on va traiter l'équation de Schrödinger à une dimension :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2+V(x)\right]\Psi(\vec{x},t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t) \quad \text{(I-29)}$$

Séparant les variables :

$$\Psi(\vec{r},t)=\varphi(x)f(t) \quad \text{(I-30)}$$

On remplace dans l'équation de Schrödinger, on obtient :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\varphi(x)\right]\ f(\mathrm{t})=\left(ih\frac{df}{dt}\right)\ \varphi(x) \quad \text{(I-31)}$$

Par conséquence :

En multipliant par $\left(\frac{1}{\varphi f}\right)$

$$\frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\varphi(x)\right]}{\varphi}=\frac{i\hbar}{f}\left(\frac{df}{dt}\right) \quad \text{(I-32)}$$

Comme le membre de gauche de l'équation ne dépend que de t et que le membre de droite ne dépend que de x ,il ne pourra y avoir de solution de la forme que si l'équation est égale à une constante qui ne dépend donc ni de ni de .Cette constante a la dimension d'une énergie appelons la E .

Alors :

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} = E \tag{I-34}$$

Par conséquent :

$$f(x) = Ae^{-i\frac{Et}{\hbar}} \tag{I-35}$$

Tandis que :

$$\frac{1}{\varphi(\mathrm{x})}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{x}^2} + \mathrm{V(x)}\varphi(\mathrm{x})\right) = E \tag{I-36}$$

Donc :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\Delta\varphi(x) + \mathrm{V(x)}\varphi(\mathrm{x}) = E\varphi(x) \tag{I-37}$$

C'est l'équation de Schrödinger stationnaire, d'où:

$$\Psi(x,t) = Ae^{-i\frac{Et}{\hbar}}\varphi(x) \tag{I-38}$$

$\varphi\,(x)$: est appelée la solution stationnaire de l'équation de Schrödinger :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\varphi(x) = 0 \tag{I-39}$$

4.2.2-L'équation de Schrödinger stationnaire à deux dimensions

Dans ce cas le potentiel dépend de deux dimensions, et l'équation de Schrödinger s'écrit comme suit :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\left(\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathrm{y}^2}\right) + \mathrm{V(x,y)}\right)\varphi(\mathrm{x,y}) = \mathrm{E}\ \varphi(\mathrm{x,y}) \tag{I-40}$$

4.2.3-L'équation de Schrödinger stationnaire à trois dimensions

On considère une particule de masse m et de vecteur position r se trouve dans un potentiel central (r). Il est préférable d'utiliser les coordonnées sphériques qui sont mieux adaptées à lapaient Δ qui s'écrit :

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \qquad \text{(I-41)}$$

Avec :

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \qquad \text{(I-42)}$$

Où L: est l'opérateur du moment cinétique

Et $0 < r < +\infty, et\ \varphi, \theta\ sont\ les\ angles\ polaire\ \ 0 \le \theta \le \pi\ et\ 0 \le \varphi \le 2\pi$

L'ha miltonien s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{2mr^2} + \mathrm{V}(\vec{\mathrm{r}})\right] \qquad \text{(I-43)}$$

Ce qui permet d'écrire l'équation Schrödinger pour un potentiel central sous la forme :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{2mr^2} + \mathrm{V}(\vec{\mathrm{r}})\right]\right)\Psi(r,\theta,\varphi) = E\Psi(r,\theta,\varphi) \qquad \text{(I-44)}$$

a- La Séparation des variables

L'expression (I-42) montre que toute la dépendance en θ, φ est contenue dans l'operateur L^2 et on a [H , L^2]=0 et [H , L_Z]=0 . Les trois observables H, L^2 , L_Z admettent un système complet de fonctions propre [9] ; de sorte que l'on a :

$$\mathrm{H}\,\Psi(r,\theta,\varphi) = E\Psi(r,\theta,\varphi) \qquad \text{(I-45)}$$

$$L^2\ \Psi(r,\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1)\Psi(r,\theta,\varphi) \qquad \text{(I-46)}$$

$$L_Z\Psi(r,\theta,\varphi) = m\hbar\Psi(r,\theta,\varphi) \qquad \text{(I-47)}$$

Les fonctions propres communes à L^2 et L_Z correspondants aux valeurs de *l* et *m* fixées sont les harmonique sphérique $Y_l^m(\theta,\varphi)$. Les fonctions $\Psi(\ \theta,\varphi)$ sont donc forcément les produit d'une fonction radial R(r) par les harmonique sphériques $Y_l^m(\theta,\varphi)$, soit :

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi) \quad \text{(I-48)}$$

En utilisant le fait que :

$$L^2\ \Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)L^2\ Y_l^m(\theta,\varphi) \quad \text{(I-49)}$$

$$= l\,(l+1)\,\hbar^2\, R(r)Y_l^m(\theta,\varphi) \quad \text{(I-50)}$$

On aboutit à l'équation radiale suivante :

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right)+\frac{l\,(l+1)\hbar^2}{2mr^2}+V(r)\right\}R(r) = ER(r) \quad \text{(I-51)}$$

Où encore :

$$\left\{\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{l\,(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]\right\}R(r) = 0 \quad \text{(I-52)}$$

Avec l : est le nombre quantique orbital.

5-Les méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire :

5.1-Méthode Numériques :

On peut citer les méthodes suivantes :

1) Méthode d'Euler

2) Heun

3) Euler améliorée

4) Runge et Kutta…

5.2-Les méthodes analytiques

5.2.1- La méthode de perturbation

Pour un problème stationnaire ou non stationnaire, l'idée est de séparer le Ha miltonien en deux parties :

$H = H_0 +$ w telle que l'on sache résoudre le problème pour H_0 , alors que *w* est considéré comme une petite correction. On appelle l'opérateur w la perturbation,

H_0 est appelée hamiltonien non perturbé. Si *w* ne dépend pas du temps, la perturbation est dite stationnaire.

Supposons donc qu'un système physique soit décrit par l'hamiltonien :

$$H = H_0 + w \qquad \text{(I-53)}$$

Où H_0 représente une grandeur physique ayant une valeur élevée par rapport à celle décrite par l'opérateur w. L'hamiltonien H_0 est appelé l'hamiltonien non perturbé et *w* est la perturbation [10].

Pour bien comprendre les modifications apportées par la perturbation, on introduit un paramètre réel λ que l'on peut faire varier de manière continue entre 0 et 1 ($0 < \lambda < 1$), ce qui permet d'installer progressivement la perturbation et on écrit alors :

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda w \qquad \text{(I-54)}$$

w est de l'ordre de H_0

Pour λ, H(λ) conoïde avec l'hamiltonien non perturbé H_0

Les valeurs propres et les vecteurs propres $E(\lambda)$ et $|\Psi(\lambda)>$ de $<H(\lambda)|$ dépendant en général de λ

a- La résolution de l'équation de perturbation aux valeurs propres de.H (λ)

L'équation aux valeurs propres de H (λ) s'écrit :

$$H(H_0)|\Psi(\lambda)> = E(\lambda)|\Psi(\lambda)> \qquad \text{(I-55)}$$

Soit :

$$(H_0 + \lambda w)\,|\Psi(\lambda)> = E(\lambda)|\Psi(\lambda)> \qquad \text{(I-56)}$$

On sait que $\lambda \ll 1$, on admet que : E (λ) et$|\Psi(\lambda)>$ peuvent être développés en puissance de λ sous la forme :

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \ldots + \lambda^p\,\varepsilon_p + \ldots = \sum_{p=0}^{\infty}\lambda^p\,\varepsilon_p \qquad \text{(I-57)}$$

Et

$$|\Psi(\lambda)> = |\Psi^0> + \lambda|\Psi^1> + \cdots \lambda^p|\Psi^p> = \sum_{p=0}^{\infty}\lambda^p|\Psi^p> \qquad \text{(I-58)}$$

Nous reportons ces développements dans l'équation (I-56) on obtient :

$$(H_0 + \lambda w)\left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\Psi^p>\right) = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \varepsilon_p \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\Psi^p>\right) \quad \text{(I-59)}$$

L'égalité des coefficients de puissances successive de λ dans les deux membres donne un ensemble des équations appelées équation de perturbation:

Ordre 0 :(λ^0)

$$(H_0 - \varepsilon_0)|\Psi^0> = 0 \quad \text{(I-60)}$$

Ordre 1 :(λ^1)

$$(H_0 - \varepsilon_0)|\Psi^1> + (w - \varepsilon_1)|\Psi^0> = 0 \quad \text{(I-61)}$$

Ordre 2 :(λ^2)

$$(H_0 - \varepsilon_0)|\Psi^2> + (w - \varepsilon_1)|\,|\Psi^1> - \varepsilon_2 |\Psi^0> = 0 \quad \text{(I-62)}$$

Ordre p :(λ^p)

$$(H_0 - \varepsilon_0)\left|\Psi^p> + \left(w - \varepsilon_{p-1}\right)\right|\,|\Psi^{p-1}> - \varepsilon_2 |\Psi^{p-2}> - \cdots .. \varepsilon_p |\Psi^0> = 0 \quad \text{(I-63)}$$

On se limitera en fait aux trois premières équations, c'est à dire qu'on négligera dans le développement de E(λ) et |Ψ(λ) les termes d'ordre supérieur à 2.

b-La correction d'énergie

On a trouvé la correction à l'énergie d'ordre 1 jusqu' à l'ordre 2 par la projection des équations de perturbation (I-56) sur l'état $|\Psi^0>$ qui donne en tenant compte.

$$<\Psi^0 |\Psi^0> = 1 \quad \text{(I-64)}$$

La correction au premier ordre à l'énergie non dégénéré E_n est donc égale à la valeur moyenne de la perturbation w dans l'état non-perturbé $|\varphi_n>$.

Donc :

$$\varepsilon_1 = <\Psi^0 |w|\Psi^0> = <\varphi_n |w|\varphi_n> \quad \text{(I-65)}$$

Avec

$$H_0 |\varphi_n> = E_n|\varphi_n> \quad \text{(I-66)}$$

La correction à l'énergie au deuxième ordre s'écrite comme suit :

$$\varepsilon_1 = \sum_{m \neq n} \frac{|<\Psi^0 |\Psi^0>|^2}{E_n - E_m} \quad \text{(I-67)}$$

b .1 - La correction au vecteur propre

La correction au $1^{ére}$ à l'ordre du vecteur propre est une superposition linéaire de tous les états non perturbés autre que cette correction s'écrit sous la forme :

$$|\Psi^1> = \sum_{m\neq n} \frac{|<\varphi_n|w|\varphi_m>|^2}{E_n - E_m} |\varphi_m> \quad \text{(I-68)}$$

$$|\Psi^2> = \sum_{m\neq p}\sum_{n\neq p}\left(C_n \frac{<\varphi_m|w|\varphi_n>}{E_n - E_m} - C_n \frac{<\varphi_p|w|\varphi_p>}{E_p - E_m}|\varphi_m> - \frac{1}{2}\sum_n |C_n|^2 |\varphi_p>\right) \quad \text{(I-69)}$$

Avec :

$$C_n = \frac{<\varphi_n|w|p>}{E_p - E_m} \quad \text{(I-69)}$$

Les valeurs propres et les vecteurs propres de l'hamiltonien perturbé s'obtiennent en utilisant les développements (1-57) et (1-58). On obtient donc :

$$|\Psi> = |\varphi_n> + \sum_{m\neq n} \frac{|<\varphi_n|w|\varphi_m>|^2}{E_n - E_m}|\varphi_m> + \ldots\ldots \quad \text{(I-70)}$$

$$E = E_n + <\varphi_n|w|\varphi_n> + \sum_{m\neq n} \frac{|<\varphi_n|w|\varphi_m>|^2}{E_n - E_m} + \ldots.. \quad \text{(I-71)}$$

5.2.2- La méthode variationnelle

La décomposition de l'hamiltonien totale H du système en une partie principale H_0 et une perturbation *w* facilite la résolution de l'équation pour les différentes valeurs et vecteurs propres dans la méthode de perturbation constante, mais l'ignorance de ces valeurs et ces vecteurs rendent la solution de l'équation très difficile, ce qui nécessite de recourir à l'autre méthode qui nécessite la connaissance de l'énergie de l'état de base, méthode variationnelle.

a-Principe de la méthode

Considérons un système physique décrit par un hamiltonien H indépendant du temps et supposons que nous connaissons ses vecteurs propres $|\varphi_n>$ et ses valeurs propres En qui sont discrètes et non dégénérées :

On a

$$H\,|\varphi_n> = E_n|\varphi_n> \quad \text{(I-72)}$$

Tout vecteur $|\Psi>$ de l'espace des états peut être toujours développé sur la base des vecteurs propres de H :

$$| \Psi > = \sum_n C_n | \varphi_n > \quad \text{(I-73)}$$

Où C_n représentent les coefficients du développement.

La valeur moyenne de l'énergie du système dans l'état $| \Psi >$ donnée par :

$$< H > = \frac{<\Psi|H|\Psi>}{<\Psi|\Psi>} \quad \text{(I-74)}$$

En remplaçant $|\Psi>$ par son expression nous obtenons :

$$< \Psi|\Psi > = \sum_n \sum_m C_m^* \, C_n < \varphi_m|\varphi_n > \quad \text{(I-75)}$$

$$= \sum_n \sum_m C_m^* \, C_n \delta_{mn} < \varphi_m|\varphi_n > = \sum_n |C_n|^2 \quad \text{(I-76)}$$

Et

$$< \Psi|H|\Psi > = \sum_n \sum_m C_m^* \, C_n < \varphi_m|H|\varphi_n > \quad \text{(I-77)}$$

$$= \sum_n \sum_m C_m^* \, C_n E_n \delta_{mn} = \sum_n |C_n|^2 E_n \quad \text{(I-78)}$$

$$E_0 \sum_n |C_n|^2 = E_0 < \Psi|\Psi > \quad \text{(I-79)}$$

Où E_0 est la valeur propre la plus petite de H donc :

$$< H > = \frac{<\Psi|H|\Psi>}{<\Psi|\Psi>} \geq E_0 \quad \text{(I-80)}$$

Qui désigne que quel que soit le choix de l'état $| \Psi >$, la valeur moyenne de l'énergie est toujours supérieure ou égale à l'énergie de l'état fondamentale. Cette égalité n'est obtenue que si tous les coefficients C_n sont nuls sauf C_0dans ce cas $| \Psi > = |\varphi_0>$ et le vecteur d'état n'est autre que celui de l'état fondamental

Chapitre II :

Solution exacte de l’équation de Schrödinger non stationnaire

1. introduction :

Il existe plusieurs méthodes pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps et atteindre la solution $|\Psi(t)>$ correspondante à la condition initiale $|\Psi(t_0)>$, et ces méthodes varient selon potentiel et de la fonction d'onde de l'équation étudiée [11].

2-Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger non stationnaire :

Il y a deux méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps : les méthodes approximatives et les méthodes exactes.

2.1 Méthodes approximatives :

- théorie de perturbation.

-méthodes varirationnelles.

-l 'approximation adiabatique.

-l'approximation soudaine.

2.2 -Méthodes exactes :

2.2.1-Transformations unitaires :

Le système physique a différents angles et références que nous pouvons regarder, Le choix de référentiel n'a pas de raison d'être unique, c'est-à-dire que l'on est libre de passer à un autre système d'axes. Etc. par l'utilisation des opérateurs unitaires U indépendants ou dépendants du temps avec la condition [3] :

$$U^{+}U = UU^{+} = 1 \qquad \text{(II-1)}$$

Les transformations unitaires servent d'outils de recherche de nouvelles représentations.

2.2.2- L'opérateur d'évolution :

L'opérateur linéaire $U(t, t_0)$ tel que :

$$|\Psi(t)> = U(t, t_0)\,|\Psi(t_0)> \qquad \text{(II-2)}$$

C’est un operateur qu'on peut l'utiliser pour déterminer l'évolution de l'état a tout instant, Dans le cas particulièrement simple où l’hamiltonien du système ne dépend pas du temps, l’opérateur $U(t, t_0)$ a une forme simple [3]:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \quad \text{(II-3)}$$

Effectivement, en prenant la dérivée partielle par rapport au temps de la fonction (II-3) on obtient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = HU(t, t_0) \quad \text{(II-4)}$$

On note que l’équation (II-4) présente le même degré de difficulté que l’équation de Schrödinger, mais elle présente plus davantage lors de l’utilisation des méthodes d’approximation. L’opérateur d’évolution total peut être ainsi décomposé en un produit d’opérateurs d’évolutions temporelles infinitésimales :

$$U(t, t_0) = U(t, t_k)\, U(t_k, t_{k-1}) \dots\dots\dots .. U(t_2, t_1) U(t_1, t_0) \quad \text{(II-5)}$$

On peut choisir $t_0, t_1, \dots\dots . t_k$ de telle sorte que les intervalles entre eux soient égaux. Donc $U(t, t_0)$ peut s’écrire :

$$U(t, t_0) = \prod_{i=1}^{N} U_i(t_i, t_i - \Delta t) \quad \text{(II-6)}$$

On en arrive à conclure que le mouvement d’un ensemble quantique peut être assimilé à une succession de transformations unitaires. Un cas particulier de la transformation (II-3), ayant de multiples applications dans la théorie de diffusion des particules, est celui où l’état initial est fixé non pas pour $t_0 = 0$; mais pour $t_0 = -\infty$ et l’état final $|\Psi(\mathrm{t}) >$ est considéré pour $t = +\infty$ l’équation (II-6) s’écrit alors :

$$|\Psi(+\infty) > = \; U(+\infty; -\infty) \;\; |\Psi(-\infty) > \quad \text{(II-7)}$$

Où il est explicitement indiqué que $t_0 = -\infty$ l’opérateur U étant défini par la formule :

$$U = U(+\infty; -\infty) = \lim_{t \to +\infty, t_0 \to -\infty} U(t, t_0) \quad \text{(II-8)}$$

Cet opérateur porte le nom de matrice de diffusion.

2.2.3-Changement de représentation :

La méthode de description la plus souvent utilisée est la description de Schrödinger [3] :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = HU(t, t_0) \quad \text{(II-9)}$$

Mais il n'est pas toujours nécessaire et dans tous les cas de s'appuyer sur cette méthode, qui repose principalement sur la solution de l'équation de Schrödinger, où il est possible d'étudier les différents phénomènes dépendants du temps. Dans d'autres descriptions comme la représentation Hisborn

$$i\hbar\frac{d}{dt}A_H(t) = [A_H(t), H(t)] + i\hbar\left(\frac{d}{dt}A_s(t)\right)_H \quad \text{(II-10)}$$

Et la représentation d'interaction qui est une description intermédiaire. Entre-les deux descriptions. Les différences entre elles dans certaines propriétés physiques qui peuvent apparaître plus immédiatement dans l'une d'elles que dans l'autre.

2.2.4-la théorie des invariants :

1. Introduction :

Cette méthode est basée principalement sur la dérivation de la relation entre les états propres et la résolution de l'équation de Schrödinger, ce qui en fait l'une des méthodes les plus puissantes qui donnent des solutions précises à l'équation en fonction du temps.

2 . Les invariants :

On considère l'équation de Schrödinger suivante :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)>= H(t)\,|\Psi\,(t)> \quad \text{(II-11)}$$

Où est l'hamiltonien du système est un opérateur auto-adjoint explicitement dépendant du temps [7].

La méthode des invariants est basée sur ce principe, elle consiste à introduire un opérateur hermitien, dit invariant s'il vérifie les deux relations suivantes :

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[I, H] = 0 \quad \text{(II-12)}$$

$$I^+(t) = I(t) \quad \text{(II-13)}$$

En appliquant l'équation (II-12) et en utilisant l'équation (II-11), nous obtenons :

$$i\hbar\frac{\partial I}{\partial t}|\Psi(t)> + Ii\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)> - H(t)I\,|\Psi(t)>= 0 \quad \text{(II-14)}$$

$$i\hbar\frac{\partial I}{\partial t}|\Psi(t)> + IH(t)|\Psi(t)\ > - H(t)I\,|\Psi(t)>= 0 \quad \text{(II-15)}$$

$$i\hbar\frac{\partial I}{\partial t}(I\,|\Psi(t)>) = H(t)(I\,|\Psi(t)>) \qquad \text{(II-16)}$$

-l'opérateur vérifie une solution de l'équation de Schrödinger, sur une autre solution de cette même équation. Ce résultat est valide pour tout invariant [12].

2.1. Propriétés de l'invariant :

a -valeurs propres de l'invariant I :

On suppose que l'invariant a un ensemble complet de fonctions propres, on note les valeurs propres de part, et les états propres orthonormés associés d'autre part, où on représente tous les autres nombres quantiques nécessaires pour spécifier les états propres de ce système.
L'équation aux valeurs propres s'écrit comme suit [13] :

$$I(t)|\varphi_{\lambda k}> = \lambda|\varphi_{\lambda k}> \qquad \text{(II-17)}$$

Avec le produit hermitien sur l'espace des états :

$$<\varphi_{\lambda k}|\,\varphi_{\lambda' k'}> = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{kk'} \qquad \text{(II-18)}$$

Cet invariant, a un spectre constant du temps, c'est à dire que les valeurs propres de cet opérateur, sont indépendantes du temps.
En dérivant l'équation (II-17) par rapport au temps, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}(I(t)\,|\varphi_{\lambda k}>) = \frac{\partial}{\partial t}(\lambda\,|\varphi_{\lambda k}>) \qquad \text{(II-19)}$$

$$\frac{\partial I}{\partial t}|\varphi_{\lambda k}> + I\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_{\lambda k}> = \frac{\partial\lambda}{\partial t}|\varphi_{\lambda k}> + \lambda\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_{\lambda k}> \qquad \text{(II-20)}$$

On applique l'équation (II-12) sur les états $|\varphi_{\lambda k}>$ propres :

$$\frac{\partial I}{\partial t}\,|\varphi_{\lambda k}> + \frac{1}{i\hbar}[I, H(t)]\,|\varphi_{\lambda k}> = 0 \qquad \text{(II-21)}$$

$$i\hbar\frac{\partial I}{\partial t}\,|\varphi_{\lambda k}> + IH|\varphi_{\lambda k}> - \lambda H|\varphi_{\lambda k}> = 0 \qquad \text{(II-22)}$$

Le produit scalaire de l'équation (II-22) par $<\varphi_{\lambda' k'}|$ donne :

$$<\varphi_{\lambda' k'}|i\hbar\frac{\partial I}{\partial t}|\,\varphi_{\lambda k}> + <\varphi_{\lambda' k'}|IH\,|\,\varphi_{\lambda k}> - <\varphi_{\lambda' k'}|\,\lambda H|\,\varphi_{\lambda k}> = 0 \qquad \text{(II-23)}$$

$$i\hbar <\varphi_{\lambda' k'}|\frac{\partial I}{\partial t}|\,\varphi_{\lambda k}> + \lambda' <\varphi_{\lambda' k'}|H|\,\varphi_{\lambda k}> - \lambda <\varphi_{\lambda' k'}|H|\,\varphi_{\lambda k}> = 0 \qquad \text{(II-24)}$$

$$i\hbar < \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > + (\lambda' - \lambda) < \varphi_{\lambda' k'} | H | \varphi_{\lambda k} > = 0 \quad \text{(II-25)}$$

Pour : $\lambda' = \lambda$

$$< \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = 0 \quad \text{(II-26)}$$

En prenant le produit scalaire de l'équation (II-22) avec l'état propre $< \varphi_{\lambda k}|$,

$$< \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > + < \varphi_{\lambda k} | I \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = < \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial \lambda}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > + \lambda < \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-27)}$$

$$< \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > + \lambda < \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = < \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial \lambda}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > + \lambda < \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-28)}$$

$$< \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = < \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial \lambda}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-29)}$$

$$< \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = \frac{\partial \lambda}{\partial t} < \varphi_{\lambda k} | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-30)}$$

On a:

$$< \varphi_{\lambda k} | \varphi_{\lambda k} > = \delta_{\lambda\lambda} \delta_{kk} = 1 \quad \text{(II-31)}$$

Alors :

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = < \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-32)}$$

Ce qui implique :

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = < \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = 0 \quad \text{(II-33)}$$

b -Les vecteurs propres de I :

Pour trouver le rapport entre les vecteurs propres et les solutions de l'équation du Schrödinger, on écrit d'abord l'équation du mouvement $|\varphi_{\lambda k} >$ de [13].

En commençant par l'équation (II-20) et en utilisant l'équation (II-25), on obtient :

$$\frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > + I \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = \frac{\partial \lambda}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > + \lambda \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-34)}$$

$$\frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > + I \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = \lambda \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-35)}$$

$$(\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-36)}$$

Le produit scalaire de l'équation avec le vecteur propre $< \varphi_{\lambda' k'} |$ est :

On déduit que :

$$< \varphi_{\lambda' k'} | (\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = < \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-37)}$$

$$(\lambda - \lambda') < \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = < \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-38)}$$

Donc :

$$I\hbar < \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > + (\lambda - \lambda') < \varphi_{\lambda' k'} | H | \varphi_{\lambda k} > = 0 \quad \text{(II-39)}$$

Pour$\lambda' \neq \lambda$ on déduit :

$$I\hbar < \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = < \varphi_{\lambda' k'} | H | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-40)}$$

Si l'équation (II-28) est valable pour $\lambda' = \lambda$ aussi bien que pour $\lambda' \neq \lambda$, alors on déduit immédiatement que $|\varphi_{\lambda k} >$ satisfait l'équation de Schrödinger, c'est-à-dire, $|\varphi_{\lambda k} >$ est une solution particulière de l'équation de Schrödinger.

Lorsque les phases des états stationnaires ne sont pas fixées, on choisit un autre ensemble de vecteurs propres *I* de multiplié par un facteur de phase dépendant du temps.

Alors :

$$|\varphi_{\lambda k} >_\alpha = e^{i\alpha(t)_{\lambda k}} |\varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-41)}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k} >_\alpha = H |\varphi_{\lambda k} >_\alpha \quad \text{(II-42)}$$

Où $\alpha(t)_{\lambda k}$ est une fonction réelle de temps arbitrairement choisie. Ces $|\varphi_{\lambda k} >_\alpha$sont des états propres orthonormées *I* (t) d'associés à λ , aussi bien que les $|\varphi_{\lambda k} >$, s'ils vérifient l'équation de Schrödinger, on obtient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{i\alpha(t)_{\lambda k}} |\varphi_{\lambda k} >) = H e^{i\alpha(t)_{\lambda k}} |\varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-43)}$$

$$i\hbar \frac{\partial e^{i\alpha(t)_{\lambda k}}}{\partial t} \left| \varphi_{\lambda k} > \right. + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left| \varphi_{\lambda k} > e^{i\alpha(t)_{\lambda k}} \right. = H e^{i\alpha(t)_{\lambda k}} |\varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-44)}$$

$$-\hbar \frac{\partial \alpha(t)_{\lambda k}}{\partial t} \left| \varphi_{\lambda k} > \right. + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left| \varphi_{\lambda k} > = H |\varphi_{\lambda k} > \right. \quad \text{(II-45)}$$

Le produit scalaire par le vecteur d'état $< \varphi_{\lambda' k'} |$ conduit à :

$$-\hbar \frac{\partial \alpha_{\lambda k}}{\partial t} < \varphi_{\lambda' k'} | \varphi_{\lambda k} > + < \varphi_{\lambda' k'} | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} > = < \varphi_{\lambda' k'} | H | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-46)}$$

$$\hbar \frac{\partial \alpha_{\lambda k}}{\partial t} < \varphi_{\lambda' k'} | \varphi_{\lambda k} > = < \varphi_{\lambda' k'} | [\, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \,] | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-47)}$$

$$\hbar \frac{\partial \alpha_{\lambda k}}{\partial t} \delta_{\lambda\lambda} \delta_{kk} = < \varphi_{\lambda' k'} | [\, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \,] | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-48)}$$

Donc on obtient :

$$\hbar \frac{\partial \alpha_{\lambda k}}{\partial t} = < \varphi_{\lambda k} | [\, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \,] | \varphi_{\lambda k} > \quad \text{(II-49)}$$

Mise à part ces changements de phase, on peut introduire la deuxième propriété importante de cet invariant : tous les états propres de ces invariants sont aussi les solutions particulières de l'équation du Schrödinger (II-11).

c -solution générale :

Du fait que chacun de ces nouveaux états propres satisfait l'équation de Schrödinger, la solution générale est donnée par [7] :

$$|\Psi(t) = \sum_{(\lambda k)} C_{\lambda k}\, e^{i\alpha(t)_{\lambda k}} |\varphi_{\lambda k} > \qquad \text{(II-50)}$$

Où $C_{\lambda k}$ sont des coefficients indépendants du temps et correspondent à $\Psi(0) >$:

$$|\Psi(0) = \sum_{(\lambda k)} C_{\lambda k}\, e^{i\alpha(0)_{\lambda k}} |\varphi(0)_{\lambda k} > \qquad \text{(II-51)}$$

Donc $|\Psi(t) >$ est la solution générale de l'équation de Schrödinger et sont les états propres de l'invariant

Chapitre III :

La Solution de l'équation De Schrödinger stationnaire et non stationnaire pour le Potentiel de Morse

1-la solution non stationnaire :

1.1-Introduction

L'étude des systèmes physiques liés au temps se déféré selon les potentiels stationnaires et non stationnaires, dont le potentiel de Morse, qui doit son nom au physicien Philip Morse et qui est aussi rarement utilisé dans les études ; C'est un modèle pratique pour l'énergie potentielle des particules diatomiques [4,15]. qui représente une meilleure approximation de la structure vibrationnelle que l'oscillateur harmonique quantique.

Tout comme l'existence d'un état non lié. Il considère également l'anharmonicité Probabilité de transition non nulle des liens et états réels harmonique.

1.2- Le potentiel de Morse :

Dans ce chapitre, nous allons résoudre l'équation de Schrödinger unidimensionnel dépend du temps pour le potentiel de Morse.

La forme générale de cette énergie potentielle est définie comme :

$$\mathrm{V(x)} = \mathrm{V_1(t)e^{-2\alpha x}} - \mathrm{V_2(t)e^{-\alpha x}} \qquad \text{(III-1)}$$

L'hamiltonien de ce système est donné par la formule suivante :

$$H(x,t) = \frac{p^2}{2m(t)} + \mathrm{V_1(t)e^{-2\alpha x}} - \mathrm{V_2(t)e^{-\alpha x}} \qquad \text{(III-2)}$$

Où $m(t), \mathrm{V_1(t)}, \mathrm{V_2(t)}$ sont des paramètres liésdu temps constants.

Comme application, nous avons choisi :

$$m(t) = m_0\, e^{-\mu t} \qquad \text{(III-3)}$$

$$\mathrm{V_1(t)} = \mathrm{V_{1_0}} e^{\mu t} \qquad \text{(III-4)}$$

$$\mathrm{V_2(t)} = \mathrm{V_{2_0}} e^{\mu t} \qquad \text{(III-5)}$$

Où m_0 ,$\mathrm{V_{1_0}}, \mathrm{V_{2_0}}$sont des constantes. En remplaçant $m(t)$, $V_1(t)$, $V_2(t)$ l'expression de l'équation (III-2), devient:

$$H(x,t) = \frac{p^2}{2m_0\, e^{-\mu t}} + \mathrm{V_{1_0}} e^{\mu t}\mathrm{e^{-2\alpha x}} - \mathrm{V_{2_0}} e^{\mu t}\mathrm{e^{-\alpha x}} \qquad \text{(III-6)}$$

En plus:

$$H(x,t) = \frac{1}{2m_0\, e^{-\mu t}}(p^2 + 2m_0\, \mathrm{V_{1_0}e^{-2\alpha x}} - 2m_0\, \mathrm{V_{2_0}e^{-\alpha x}}) \qquad \text{(III-7)}$$

Et donc :

$$H(x,t) = \frac{1}{2m(t)}(p^2 + \gamma_1 \mathrm{e^{-2\alpha x}} - \gamma_2 \mathrm{e^{-\alpha x}}) \qquad \text{(III-8)}$$

Avec :

$$\gamma_1 = 2m_0 \, \mathrm{V}_{1_0} \tag{III-9}$$

$$\gamma_2 = 2m_0 \, \mathrm{V}_{2_0} \tag{III-10}$$

γ_1 et γ_2 sont des constantes.

L'équation de Schrödinger dépendante du temps est :

$$H\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) \tag{III-11}$$

Notre système a évolué au fil du temps comme suit :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \frac{1}{2m(t)} (p^2 + \gamma_1 \mathrm{e}^{-2\alpha x} - \gamma_2 \mathrm{e}^{-\alpha x}) \Psi(x,t) \tag{III-12}$$

Pour résoudre cette équation, on pose :

$$s = \int \frac{1}{2m(t)} dt \tag{III-13}$$

Et donc :

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{2m(t)} \frac{\partial}{\partial s} \tag{III-14}$$

Et :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \Psi(x,s) = (p^2 + \gamma_1 \mathrm{e}^{-2\alpha x} - \gamma_2 \mathrm{e}^{-\alpha x}) \Psi(x,s) \tag{III-15}$$

Dans ce cas, nous pouvons utiliser la méthode de séparation des variables:

$$\Psi(x,s) = \varphi(x) f(s) \tag{III-16}$$

On a:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \big(\varphi(x) f(s)\big) = (p^2 + \gamma_1 \mathrm{e}^{-2\alpha x} - \gamma_2 \mathrm{e}^{-\alpha x})(\varphi(x) f(s)) \tag{III-17}$$

En divisant l'équation (III-17) par $\big(\varphi(x) f(s)\big)$, on obtient finalement :

$$\frac{i\hbar}{f(s)} \frac{\partial f(s)}{\partial s} = \frac{1}{\varphi(x)} H_0 \varphi(x) = \varepsilon_n = constant \tag{III-18}$$

On obtient les deux équations différentielles suivantes :

$$H_0 \varphi(x) = \varepsilon_n \varphi(x) \tag{III-19}$$

Avec :

$$\frac{i\hbar}{f(s)} \frac{\partial f(s)}{\partial s} = \varepsilon_n \tag{III-20}$$

Avec:

$$H_0 = p^2 + \gamma_1 \mathrm{e}^{-2\alpha x} - \gamma_2 \mathrm{e}^{-\alpha x} \qquad \text{(III-21)}$$

La solution de l'équation (III-20) :

$$f(s) = C_n e^{-\frac{i\varepsilon_n s}{\hbar}} \qquad \text{(III-22)}$$

Où C_n: est la constante de normalisation.

En substituant l'expression (III-13) dans la formule (III-22) on obtient :

$$f(s) = C_n e^{-\frac{i[e^{\mu t}-1]\varepsilon_n}{2\mu m_0 \hbar}} \qquad \text{(III-23)}$$

Maintenant, on cherche la solution de l'équation (III-19) :

$$(p^2 + \gamma_1 \mathrm{e}^{-2\alpha x} - \gamma_2 \mathrm{e}^{-\alpha x})\, \varphi(x) = \varepsilon_n \varphi(x) \qquad \text{(III-24)}$$

Elle se transforme à l'équation différentielle suivante :

$$\varphi''(x) + \frac{1}{\hbar^2}(\varepsilon_n - \gamma_1 \mathrm{e}^{-2\alpha x} - \gamma_2 \mathrm{e}^{-\alpha x})\, \varphi(x) = 0 \qquad \text{(III-25)}$$

Pour résoudre cette équation différentielle, nous allons utiliser ce changement de variable :

$$z = \sqrt{\gamma_1} e^{-\alpha x} \qquad \text{(III-26)}$$

D'où

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}\right) = \left(-\alpha z \frac{d}{dz}\right)\left(-\alpha z \frac{d}{dz}\right) = \alpha^2 z \frac{d}{dz} + \alpha^2 z^2 \frac{d^2}{dz^2} \qquad \text{(III-27)}$$

On a:

$$\left[\alpha^2 z^2 \frac{d^2}{dz^2} + \alpha^2 z \frac{d}{dz} + \frac{1}{\hbar^2}(\varepsilon_n - z^2 + \frac{\gamma_2}{\sqrt{\gamma_1}} z)\right] \varphi(x) = 0 \qquad \text{(III-28)}$$

Et donc :

$$\varphi''_n(x) + \frac{1}{z}\varphi'_n(z) + \frac{1}{z^2}\left[-\frac{z^2}{\alpha^2\hbar^2} + \frac{\gamma_2}{\alpha^2\hbar^2\sqrt{\gamma_1}} z + \frac{\varepsilon_n}{\alpha^2\hbar^2}\right] \varphi_n(z) = 0 \qquad \text{(III-29)}$$

Pour résoudre cette équation, nous utilisons la méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U) [5]

1.3-La méthode (N_U) :

La méthode (N_U) est une méthode qui dépend principalement de la transformation appropriée de coordonné *s = s(t)* dans chaque cas des coordonnées et c'est pour simplifier l'équation différentielle du second degré et l'amener à une équation de type géométrique comme suite [14] :

$$\Psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\Psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\Psi(s) = 0 \qquad \text{(III-30)}$$

Où $\sigma(s) et\ \tilde{\sigma}(s)$ sont des polynômes de degré non supérieur à2, et$\tilde{\tau}(s)$ est unpolynôme d'ordre non supérieur à1. Si nous prenons la factorisation :

$$\Psi(s) = \emptyset(s)y(s) \qquad \text{(III-31)}$$

L'équation. (III-30) devient :

$$\sigma(s)y''(s) + \tau(s)y'(s) + \vartheta y(s) = 0 \qquad \text{(III-32)}$$

Et la fonction $\emptyset(s)$ est définie comme un dérivé logarithmique :

$$\frac{\emptyset'(s)}{\emptyset(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \qquad \text{(III-33)}$$

L'autre partie $y(s)$ est le type de la fonction hypergéométrique dont les solutions Polynomiales sont données par la formule de Rodrigues :

$$y_n(x) = \frac{B_n}{\rho(s)}\frac{d^n}{ds^n}[\sigma^n(s)\rho(s)] \qquad \text{(III-34)}$$

Où B_n est la constante de normalisation, et la fonction de poids doit satisfaire la Condition :

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho \qquad \text{(III-35)}$$

La fonctionπ et le paramètre ϑ requis pour cette méthode sont définis comme suit:

$$\pi(s) = \frac{\sigma'-\tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'-\tilde{\tau}}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma} - k\sigma} \qquad \text{(III-36)}$$

$$\vartheta = k + \pi \qquad \text{(III-37)}$$

Alternativement, dont le but de trouver la valeur de k, l'expression sous la racine carrée doit être le carré d'un polynôme. Ainsi, une nouvelle équation aux valeurs propres pour l'équation hypergéométrique devient :

$$\vartheta = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma'' \qquad \text{(III-38)}$$

Où

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) \qquad \text{(III-39)}$$

Et son dérivé est négatif

L'équation suivante est une équation qui peut être obtenue et étudiée en différentes potentiels, et c'est une forme générale de l'équation de Schrödinger.

$$\left[\frac{d^2}{ds^2}+\frac{\alpha_1-\alpha_2 s}{s(1-\alpha_3 s)}\frac{d}{ds}+\frac{-\varepsilon_1 s^2+\varepsilon_2 s-\varepsilon_3}{s^2(1-\alpha_3 s)^2}\right]\Psi=0 \qquad \text{(III-40)}$$

Nous comparons l'équation. (III-40) avec l'équation. (III-29) de notre système, on trouve :

$$\begin{cases}\varepsilon_1=\frac{1}{\alpha^2\hbar^2}\\ \varepsilon_2=\frac{\gamma_2}{\alpha^2\hbar^2\sqrt{\gamma_1}}\\ \varepsilon_3=\frac{-\varepsilon_n}{\alpha^2\hbar^2}\end{cases} \qquad \text{(III-41)}$$

Et :

$$\begin{cases}\alpha_1=1\\ \alpha_2=0\\ \alpha_3=0\end{cases} \qquad \text{(III-42)}$$

Nous pouvons résoudre ceci comme suit. Lorsque l'équation. (III-40) est comparée avec l'équation. (III-30), nous obtenons

$$\tilde{\tau}=\alpha_1-\alpha_2 s \qquad \text{(III-43)}$$

Et

$$\sigma=s(1-\alpha_3 s) \qquad \text{(III-44)}$$

Et aussi

$$\tilde{\sigma}=-\varepsilon_1 s^2+\varepsilon_2 s-\varepsilon_3 \qquad \text{(III-45)}$$

En substituent ceux-ci dans l'équation. (III-36), on obtient

$$\pi(s)=\alpha_4+\alpha_5 s\pm\sqrt{(\alpha_6-k\alpha_3)s^2+(\alpha_7+k)s+\alpha_8} \qquad \text{(IV-46)}$$

Où

$$\alpha_4=\frac{1}{2}(1-\alpha_1) \qquad \text{(III-47)}$$

$$\alpha_5=\frac{1}{2}(\alpha_2-2\alpha_3) \qquad \text{(III-48)}$$

$$\alpha_6=({\alpha_5}^2+\varepsilon_1) \qquad \text{(III-49)}$$

$$\alpha_7=2\alpha_4\alpha_5-\varepsilon_2 \qquad \text{(III-50)}$$

$$\alpha_8={\alpha_4}^2+\varepsilon_3 \qquad \text{(III-51)}$$

Dans l'équation. (III-46), la fonction sous la racine carrée doit être le carrée d'un

Polynôme conformément à la méthode de (N-U), de telle sorte que

$$k_{1,2} = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) \pm 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \quad \text{(III-52)}$$

Où, nous définissons

$$\alpha_9 = \alpha_3\alpha_7 + {\alpha_3}^2\alpha_8 + \alpha_6 \quad \text{(III-53)}$$

Pour chaque$k$ les fonctions π sont obtenues. Pour

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) - 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \quad \text{(III-54)}$$

π Devient

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5 s - \left[\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}}\right)s - \sqrt{\alpha_8}\right] \quad \text{(III-55)}$$

Pour le même k, pour les équations. (III-39), (III-43) et (III-46) :

$$\tau = \alpha_1 + 2\alpha_4 - (\alpha_2 - 2\alpha_5)s - 2\left[\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right)s - \sqrt{\alpha_8}\right] \quad \text{(III-56)}$$

Et

$$\tilde{\tau} = -(\alpha_2 - 2\alpha_5) - 2\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) = -2\alpha_3 - 2\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) < 0 \quad \text{(III-57)}$$

Quand l'équation. (III-37) est utilisée avec l'équation. (III-38) et l'équation. (III-57)

l'équation suivante est dérivée :

$$\alpha_2 n - (2n+1)\alpha_5 + (2n+1)\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) + n(n-1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} = 0 \quad \text{(III-58)}$$

Cette équation donne le spectre de l'énergie pour le problème donné. Pour l'équation .(III-35)

$$\rho(s) = s^{\alpha_{10}-1}(1 - \alpha_3 s)^{\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1} \quad \text{(III-59)}$$

Est trouvé et lorsque cette équation est utilisée dans l'équation. (III-34)

$$y_n = {P_n}^{\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1}(1 - 2\alpha_3 s) \quad \text{(III-60)}$$

Est obtenue, où,

$$\alpha_{10} = \alpha_1 + 2\alpha_4 + 2\sqrt{\alpha_8} \quad \text{(III-61)}$$

Et

$$\alpha_{11} = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) \quad \text{(III-62)}$$

Et ${P_n}^{(\alpha,\beta)}$ sont les polynômes de Jacobi. Utilisant l'équation. (III-33),

$$\varphi(s) = s^{\alpha_{12}}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} \quad \text{(III-63)}$$

Est obtenue et le la solution générale devient

$$\Psi = \varphi(s) y(s) \quad \text{(III-64)}$$

$$\Psi = s^{\alpha_{12}}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} P_n^{\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1}(1 - 2\alpha_3 s) \quad \text{(III-65)}$$

Ici, les fonctions alpha sont données par :

$$\alpha_{12} = \alpha_4 + \sqrt{\alpha_8} \quad \text{(III-66)}$$

Et

$$\alpha_{13} = \alpha_5 - \left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}\right) \quad \text{(III-67)}$$

Pour quelques problèmes $\alpha_3 = 0$. Pour ces types de problèmes quant

$$\lim_{\alpha_{3 \to 0}} P_n^{\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1}(1 - 2\alpha_3 s) = L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11} s) \quad \text{(III-68)}$$

Et

$$\lim_{\alpha_{R \to 0}} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} = e^{\alpha_{13} s} \quad \text{(III-69)}$$

La solution donnée dans l'équation. (III-65) devient

$$\Psi = s^{\alpha_{12}} e^{\alpha_{13} s} L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11} s) \quad \text{(III-70)}$$

Dans certains cas, on a besoin d'une deuxième solution de l'équation. (III-46). Dans ce cas, si la même procédure est suivie on utilise

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8) + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} \quad \text{(III-71)}$$

Cette solution devient

$$\Psi = s^{\alpha_{12}^*}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12}^* - \frac{\alpha_{13}^*}{\alpha_3}} P_n^{(\alpha_{10}^* - 1, \frac{\alpha_{11}^*}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1)}(1 - 2\alpha_3 s) \quad \text{(III-72)}$$

Le spectre d'énergie est

$$\alpha_2 n - 2n\alpha_5 + (2n+1)\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}\right) + n(n-1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} + \alpha_5 = 0 \quad \text{(III-73)}$$

Les paramètres prédéfinis alpha étoile sont les suivants :

$$\alpha_{10}^* = \alpha_1 + 2\alpha_4 - 2\sqrt{\alpha_8} \quad \text{(III-74)}$$

$$\alpha_{11}^* = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}\right) \quad \text{(III-75)}$$

$$\alpha_{12}^* = \alpha_4 - \sqrt{\alpha_8} \quad \text{(III-76)}$$

$$\alpha_{12}^{*}= \alpha_5 - \left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) \quad \text{(III-77)}$$

Ceux-ci nous permettent de calculer les paramètres de notre système :

$$\alpha_1 = 1,\ \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = \alpha_5 = 0$$

$$\alpha_6 = \alpha_9 = \frac{1}{\alpha^2\hbar^2},\ \alpha_7 = \frac{-\gamma_2}{\alpha^2\hbar^2\sqrt{\gamma_1}},\ \alpha_8 = \frac{-\varepsilon_n}{\alpha^2\hbar^2},\ \alpha_{10} = 1 + \frac{2}{\alpha\hbar}\sqrt{-\varepsilon_n}$$

$$\alpha_{11} = \frac{2}{\alpha\hbar},\ \alpha_{12} = \frac{1}{\alpha\hbar}\sqrt{-\varepsilon_n}\ ,\ \alpha_{13} = -\frac{1}{\alpha\hbar} \quad \text{(III-78)}$$

1.4-l'énergie :

Les valeurs propres de la fonction Φ(x) sont :

$$\varepsilon_n = -\frac{\alpha^2\hbar^2}{4}\left[(2n+1) - \frac{\gamma_2}{\alpha\hbar\sqrt{\gamma_1}}\right]^2 \quad \text{(III-79)}$$

Pour obtenir le spectre d'énergie, on utilise la formule suivante :

$$E(t) = \frac{1}{2m(t)}\varepsilon_n \quad \text{(III-80)}$$

Et

$$E(t) = -\frac{\alpha^2\hbar^2}{8m_0e^{-\mu t}}\left[(2n+1) - \frac{\gamma_2}{\alpha\hbar\sqrt{\gamma_1}}\right]^2 \quad \text{(III-81)}$$

La solution de l'équation (III-29) est :

$$\varphi(x) = (\sqrt{\gamma_1}e^{-ax})^{\frac{\sqrt{-\varepsilon_n}}{\alpha\hbar}}e^{-\frac{1}{\alpha\hbar}\sqrt{\gamma_1}e^{-ax}}L_n^{2\frac{\sqrt{-\varepsilon_n}}{\alpha\hbar}}(\frac{2}{\alpha\hbar}\sqrt{\gamma_1}e^{-ax}) \quad \text{(III-82)}$$

1.5-Fonction d'onde :

La fonction propre de notre système est donnée par :

$$\Psi(x,t) = C_n e^{-\frac{i[e^{\mu t}-1]\varepsilon_n}{2\mu m_0\hbar}}(\sqrt{\gamma_1}e^{-ax})^{\frac{\sqrt{-\varepsilon_n}}{\alpha\hbar}}e^{-\frac{1}{\alpha\hbar}\sqrt{\gamma_1}e^{-ax}}L_n^{2\frac{\sqrt{-\varepsilon_n}}{\alpha\hbar}}(\frac{2}{\alpha\hbar}\sqrt{\gamma_1}e^{-ax}) \quad \text{(III-83)}$$

Où L_n^{β}est le polynôme de Laguerre et C_n est la constante de normalisation.

C_n est déterminée par la condition :

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,t)|^2dx = 1 \quad \text{(III-84)}$$

On trouve :

$$C_n = \sqrt{\frac{\frac{2}{\hbar}\left(\frac{2}{\hbar\alpha}\right)^{\beta-1}}{\sum_{m=0}^{n}\sum_{m'=0}^{n}\frac{(-1)^{m+m'}[(n+\beta)!]^2}{(n-m)!(n-m')!(\beta+m)!(\beta+m')!m!m'!}\Gamma(\beta+m+m')}}} \quad \text{(III-85)}$$

Où $\beta = 2n + 1 - \frac{\gamma_2}{\alpha\hbar\sqrt{\gamma_1}}$

Nous avons utilisé la propriété de polynômes de Laguerre suivante :

$$\int_0^{+\infty} z^{\beta-1}e^{-z}\,(L_n^{\beta}(z))^2 dz = \sum_{m=0}^{n}\sum_{m'=0}^{n}\frac{(-1)^{m+m'}[(n+\beta)!]^2}{(n-m)!(n-m')!(\beta+m)!(\beta+m')!m!m'!}\Gamma(\beta+m+m') \quad \text{(III-86)}$$

Avec :

$$L_n^{\beta}(z) = \sum_{m=0}^{n}\frac{(-1)^m[(n+\beta)!]^2}{(n-m)!(\beta+m)!m!}z^2 \quad \text{(III-87)}$$

Où Γ(x) : est la fonction gamma.

On remarque que la fonction d'onde obtenue pour notre système contient

Une phase dépendante du temps qui est donnée par:

$\frac{\alpha^2\hbar^2}{8\mu m_0}\left[(2n+1) - \frac{\gamma_2}{\alpha\hbar\sqrt{\gamma_1}}\right]^2 [e^{\mu t} - 1]$Cette phase représente la phase dynamique,

Donc la phase de Berry est nulle.

2- Solution de l'équation stationnaire :

2.1. Introduction

Dans ce cas, la solution de l'équation de Schrödinger permet d'étudier le système quantique relatif à l'oscillateur harmonique et d'obtenir les énergies et les états propres, et cela passe par la méthode de changement de variable à une dimension et la méthode directe via les polynômes de Laguerre.

2.2-Méthode de changement de variable à une dimension :

D'après ce que nous avons écrit auparavant on dit que l'équation de Schrödinger ainsi obtenues considérée comme indépendante du temps sa forme est [4,15] :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_0\left(e^{\frac{2x}{r_e}} - 2\,e^{\frac{-x}{r_e}}\right)\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{(III-88)}$$

Où le potentiel de Morse unidimensionnel est :

$$V(x) = V_0(\, e^{\frac{2x}{r_e}} - 2\, e^{\frac{-x}{r_e}}\,) \qquad \text{(III-89)}$$

Pour simplifier cette équation on définit les variables :

$$k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\alpha = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \qquad \text{(III-90)}$$

$$z = 2k_0 r_e\, e^{\frac{-x}{r_e}} e = a r_e \qquad \text{(III-91)}$$

De plus on a que :

$$\partial_x^2 = (\partial_x^2 z)\partial_z + (\partial_x z)\partial_z^2 \qquad \text{(III-92)}$$

Ainsi l'équation de Schrödinger deviendrait :

$$(\partial_z^2 + \frac{1}{z}\partial_z - \frac{1}{4} + \frac{k_0 r_e}{z} - \frac{e^2}{z^2})\psi(z) = 0 \qquad \text{(III-93)}$$

En posant : $k_0 x = n + e + \frac{1}{2}$

Alors les comportements asymptotiques de l'équation (III-94)

Prennent les formes suivantes :

Pour z $\rightarrow \infty$ l'équation devient :

$$(\ \partial_z^2 - \frac{1}{4})\psi(z) = 0 \qquad \text{(III-94)}$$

Qui a pour solution $e^{-\frac{x}{2}}$

Pour $z \rightarrow 0$ l'équation devient

$$\left(\partial_z^2 + \frac{1}{z}\partial_z - \frac{e^2}{z^2}\right)\psi(z) = 0 \qquad \text{(III-95)}$$

Qui a pour solution z^e

Ainsi on choisit l'Ansât suivant :

$$\psi(z) = z^e e^{-\frac{z}{2}}\varphi(z) \qquad \text{(III-96)}$$

Avec $\varphi(z)$une fonction à déterminer, on trouve :

$$(z\,\partial_z^2 + (2e + 1 - z)\partial_z + n)\varphi(z) = 0 \qquad \text{(III-97)}$$

Qui correspond à l'équation hypergéométrique confluente :

$$z\,\partial_z^2\,\mu(z) + (c - z)\partial_z\mu(z) - a\mu(z) = 0 \qquad \text{(III-98)}$$

Qui a pour solution la fonction hypergéométrique confluente

$$F_1(a;\ c;\ z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(c)_n} . \frac{z^n}{n!} \qquad \text{(III-99)}$$

Ou $(a)_n$ désigne le symbole de Pochâmes c'est-à-dire :

$$(x)_n = x(x-1)(x-2)\ldots\ldots(x-n+1) \qquad \text{(III-100)}$$

Ainsi :

$$\varphi(z) = F_1(-n;\ 2e\ +\ 1;\ z) \qquad \text{(III-101)}$$

Et la solution de l'équation de Schrödinger est :

$$\psi(z)\ =\ F_1(-n;\ 2e\ +\ 1;\ z)z^e e^{-\frac{z}{2}} \qquad \text{(III-102)}$$

2.3-Méthode directe via les polynômes de Laguerre :

Dans cette partie du travail, l'équation de Schrödinger est résolue d'une manière qui permet une étude quantique de l'oscillateur de Morse et le début de l'étude se fait par un hamiltonien de cet oscillateur pour une molécule diatomique de masse m :

$$H_0 = \frac{P_X^2}{(2m)} + V\,(x) \qquad \text{(III-103)}$$

Qui contient une partie cinétique et une partie potentielle importante pour ce travail qui s'écrit comme : $V\,(x)\ =\ 12\beta\ e^{-x}(\ e^{-x}\ -\ 2)$ Ou beta est la profondeur du potentiel

Pour être dans le même contexte, nous faisons une équivalence entre les deux potentiels ce qui nous amène à poser $12\beta = V_0$.

Résoudre l'équation de Schrödinger revient à la détermination des vecteurs propres et leurs Énergies correspondantes via l'expression suivante :

$$H_0\varphi_n = E_n\varphi_n \qquad \text{(III-104)}$$

Ou φ_n les écrivent comme des polynômes de Laguerre via la fameuse relation :

$$\varphi_n = N_n z^{\lambda-n-\frac{1}{2}} e^{-\frac{z}{2}} L_n^k(z), \qquad \text{(III-105)}$$

Avec la substitution suivante on obtient :

$$z = 2\lambda e^{-x}\ , \quad \lambda^2 = \frac{2m\beta}{h^2} Nn = \left(k \frac{n!}{(2\lambda-n-1)!}\right)^2 \qquad \text{(III-106)}$$

$$k = 2\lambda - 2n - 1\ , \quad L_n^k(z) = \frac{z^{-k}e^z}{n!} \frac{dn}{dzn} e^{-z} e^{n+k} \qquad \text{(III-107)}$$

Les énergies propres auront l'expression suivante :

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m}(\lambda - \mathrm{n} - \tfrac{1}{2})^2\ ,\ n = 0,1,2 \qquad n < \lambda - \tfrac{1}{2} \qquad \text{(III-108)}$$

Avec $L_n^k(z)$ sont les polynômes de Laguerre généralisés

2.4 -Les états propres :

Après la résolution de l'équation de Schrödinger, les états stationnaires de potentiel de Morse correspondent aux valeurs propres suivantes :

$$E(\upsilon) = h\upsilon_0 \left(\upsilon + \frac{1}{2}\right) - \frac{\left[h\upsilon_0\left(\upsilon+\frac{1}{2}\right)\right]^2}{4D_e} \qquad \text{(III-109)}$$

Où υ est le nombre quantique de vibration, et υ_0 a une dimension de fréquence, et est mathématiquement reliée à la masse de la particule, m, et aux constantes de Morse par [4,15]:

$$\upsilon = \frac{a}{2\pi}\sqrt{\frac{2D_e}{m}} \qquad \text{(III-110)}$$

Et l'espace énergétique entre les niveaux d'énergie vibratoire de l'oscillateur harmonique L'énergie de la constante quantique entre les niveaux d'énergie adjacents de $h\upsilon_0$ diminue avec l'augmentation de υ Oscillateur Morse. Mathématiquement, la différence entre les niveaux Morse est :

$$E(\upsilon + 1) - E(\upsilon) = h\upsilon_0 - (\upsilon + 1)\frac{h{\upsilon_0}^2}{2D_e} \qquad \text{(III-111)}$$

Ce comportement correspond à l'anharmonicité des molécules réelles. Cependant, ce Pour certaines valeurs deυ, où $E(\upsilon + 1) - E(\upsilon)$ vaut zéro ou Négatif. Cela est dû au nombre limité de niveaux d'énergie de liaison dans le potentiel Morse et vice Maintenir la machine virtuelle liée. Pour tous les niveaux d'énergie supérieurs à υ_m Cela peut être autorisé, et l'équation pour $E(\upsilon)$ n'est plus valide.

En dessous deυ_m, $E(\upsilon)$ est une bonne approximation de la structure vibrante réelle Les molécules diatomiques ne tourne pas. En fait, le spectre moléculaire réel est généralement lissé par la formule suivante [15] :

$$\frac{E(\upsilon)}{hc} = w_e\left(\upsilon + \frac{1}{2}\right) - w_e x_e\left(\upsilon + \frac{1}{2}\right)^2, \qquad \text{(III-112)}$$

Où les constantes w_e , $w_e x_e$ peuvent être directement liées aux paramètres du potentiel de Morse.

Chapitre IV :

La Solution de l'équation de Schrödinger stationnaire non stationnaire pour le potentiel de Pösch_Teller :

1-la solution stationnaire :

1.1-introduction

Comme dans le cas de potentiel de Morse, le potentiel de Poschl-Teller stationnaire décrit la vibration moléculaire diatomique [4,16] en simplifiant l'équation différentielle du second ordre en une équation de type hypergéométrique utilisant la méthode N-U pour obtenir les fonctions d'ondes en terme du polynômes de jacobi.et ainsi atteindre l'objectif principal, qui est de résoudre l'équation de Schrödinger .

2-l'équation de Schrödinger :

2.1- la solution de l'équation de Schrödinger stationnaire :

Le potentiel hyperbolique indépendant du temps unidimensionnel est donné par:

$$V(\mathrm{x}) = \frac{-V_0}{Ch^2 \alpha x} \qquad \text{(IV-1)}$$

Où V_0 et α. Sont des constants.

L'équation de Schrödinger stationnaire pour le potentiel hyperbolique unidimensionnel est donner par :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{V_0}{Ch^2 \alpha x}\right)\right]\Psi(x) = 0 \qquad \text{(IV-2)}$$

On pose : $y = th\alpha x$ on obtient l'équation différentielle suivante :

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} - \frac{2y}{1-y^2}\frac{d}{dy} + \frac{2m}{\hbar^2\alpha^2}\frac{1}{(1-y^2)^2}(E - V_0 - V_0 y^2)\right]\Psi(y) = 0 \qquad \text{(IV-3)}$$

Pour obtenir la formule qui permet d'appliquer la méthode (N-U) en utilisant le changement de variable suivant : $\mathrm{S} = y^2$ l'équation de Schrödinger devient donc sous la forme :

$$\left\{\frac{d^2}{ds^2} - \frac{\frac{1}{2}-\frac{3s}{2}}{s(1-s)}\frac{d}{ds} + \frac{1}{s^2(1-s)^2}\left[\frac{m}{2\hbar^2\alpha^2}(E - V_0)s - \frac{mV_0}{2\hbar^2\alpha^2}s^2\right]\right\}\Psi(s) = 0 \qquad \text{(IV-4)}$$

Cette équation a la forme de l'équation suivante:

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1-\alpha_3 s)}\frac{d}{ds} + \frac{\varepsilon_1 s^2 + \varepsilon_2 s - \varepsilon_3}{s^2(1-\alpha_3 s)^2}\right]\Psi(s) = 0 \qquad \text{(IV-5)}$$

Pour résoudre cette équation, on utilise la méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U)

2.1.1- La méthodes (N_U) :

Comme nous l'avons mentionné dans l'introduction, cette méthode est la première étape pour atteindre la solution de l'équation, et c'est en la transférant d'une équation différentielle du second ordre à une équation de type hypergéométrique par une transformation appropriée de coordonnées $s = s(t)$ comme suit :

$$\Psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\Psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\Psi(s) = 0 \qquad \text{(IV-6)}$$

Où $\sigma(s)\ et\ \tilde{\sigma}(s)$ sont des polynômes de degré non supérieur à 2, et est un polynôme

D'ordre non supérieur à 1. Si nous prenons la factorisation :

$$\Psi(s) = \emptyset(s)y(s) \qquad \text{(IV-7)}$$

L'Equation. (IV-6) devient:

$$\sigma(s)y''(s) + \tau(s)y'(s) + \vartheta y(s) = 0 \qquad \text{(IV-8)}$$

Et la fonction $\emptyset(s)$ est définie comme dérivé logarithmique :

$$\frac{\emptyset'(s)}{\emptyset(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \qquad \text{(IV-9)}$$

L'autre partie $y(s)$ est le type de la fonction hypergéométrique dont les solutions Polynomiales sont données par la formule de Rodrigues :

$$y_n(x) = \frac{B_n}{\rho(s)}\frac{d^n}{ds^n}[\sigma^n(s)\rho(s)] \qquad \text{(IV-10)}$$

Où $B_n$est la constante de normalisation, et la fonction de poids doit satisfaire la condition :

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho \qquad \text{(IV-11)}$$

La fonction π et le paramètreϑ requis pour cette méthode sont définis comme suit:

$$\pi(s) = \frac{\sigma'-\tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'-\tilde{\tau}}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma} - k\sigma} \qquad \text{(IV-12)}$$

$$\vartheta = k + \pi \qquad \text{(IV-13)}$$

Alternativement, dont le but de trouver la valeur de k , l'expression sous la racine carrée doit être le carré d'un polynôme. Ainsi, une nouvelle équation aux valeurs propres pour l'équation hypergéométrique devient [5,16] :

$$\vartheta = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma'' \tag{IV-14}$$

Où

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) \tag{IV-15}$$

Et son dérivé est négatif.

L'équation suivante est une forme générale de l'équation de Schrödinger, qui peut être obtenue avec différents potentiels.

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1-\alpha_3 s)}\frac{d}{ds} + \frac{-\varepsilon_1 s^2 + \varepsilon_2 s - \varepsilon_3}{s^2(1-\alpha_3 s)^2}\right]\Psi = 0 \tag{IV-16}$$

Nous pouvons résoudre ceci comme suit. Lorsque l'équation. (IV-16) est comparée avec l'équation. (IV-6), nous obtenons

$$\tilde{\tau} = \alpha_1 - \alpha_2 s \tag{IV-17}$$

Et

$$\sigma = s(1 - \alpha_3 s) \tag{IV-18}$$

Et aussi

$$\tilde{\sigma} = -\varepsilon_1 s^2 + \varepsilon_2 s - \varepsilon_3 \tag{IV-19}$$

En substituent ceux-ci dans l'équation. (IV-12)

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5 s \pm \sqrt{(\alpha_6 - k\alpha_3)s^2 + (\alpha_7 + k)s + \alpha_8} \tag{IV-20}$$

Où

$$\alpha_4 = \frac{1}{2}(1 - \alpha_1) \tag{IV-21}$$

$$\alpha_5 = \frac{1}{2}(\alpha_2 - 2\alpha_3) \tag{IV-22}$$

$$\alpha_6 = (\alpha_5{}^2 + \varepsilon_1) \tag{IV-23}$$

$$\alpha_7 = 2\alpha_4\alpha_5 - \varepsilon_2 \tag{IV-24}$$

$$\alpha_8 = {\alpha_4}^2 + \varepsilon_3 \quad \text{(IV-25)}$$

Dans l'Equation. (IV-20), la fonction sous la racine carrée doit être le carrée d'un polynôme conformément la méthode de (NU), de telle sorte que

$$k_{1,2} = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) \pm 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \quad \text{(IV-26)}$$

Où, nous définissons

$$\alpha_9 = \alpha_3\alpha_7 + {\alpha_3}^2\alpha_8 + \alpha_6 \quad \text{(IV-27)}$$

Les fonctions sont obtenues. Pour

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) - 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \quad \text{(IV-28)}$$

Devient

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5 s - \left[\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}}\right)s - \sqrt{\alpha_8}\right] \quad \text{(IV-29)}$$

Les mêmes choses pour les équations. (IV-15), (IV-17) et (IV-20)

$$\tau = \alpha_1 + 2\alpha_4 - (\alpha_2 - 2\alpha_5)s - 2\left[\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right)s - \sqrt{\alpha_8}\right] \quad \text{(IV-30)}$$

Et

$$\tilde{\tau} = -(\alpha_2 - 2\alpha_5) - 2\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) = -2\alpha_3 - 2\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) < 0 \quad \text{(IV-31)}$$

Sont obtenues. Quand l'équation. (IV-13) est utilisée avec l'équation. (IV-14) et l'équation (IV-31) l'équation suivante est dérive:

$$\alpha_2 n - (2n+1)\alpha_5 + (2n+1)\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) + n(n-1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} = 0 \quad \text{(IV-32)}$$

Cette équation donne le spectre de l'énergie pour le problème donné. Pour l'équation. (IV-11)

$$\rho(s) = s^{\alpha_{10}-1}(1 - \alpha_3 s)^{\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1} \quad \text{(IV-33)}$$

est trouvé et lorsque cette équation est utilisée dans l'équation. (IV-10)

$$y_n = P_n^{\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1}(1 - 2\alpha_3 s) \quad \text{(IV-34)}$$

est obtenue, ou,

$$\alpha_{10} = \alpha_1 + 2\,\alpha_4 + 2\sqrt{\alpha_8} \tag{IV-35}$$

Et

$$\alpha_{11} = \alpha_2 - 2\,\alpha_5 + 2\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) \tag{IV-36}$$

Et $P_n^{(\alpha,\beta)}$sont les polynômes de Jacobi. Utilisant l'équation. (IV-9)

$$\varphi(s) = s^{\alpha_{12}}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12}-\frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} \tag{IV-37}$$

Est obtenue et le la solution générale devient

$$\Psi = \varphi(s)y(s) \tag{IV-38}$$

$$\Psi = s^{\alpha_{12}}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12}-\frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} P_n^{\alpha_{10}-1,\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3}-\alpha_{10}-1}(1 - 2\,\alpha_3 s) \tag{IV-39}$$

Ici, les fonctions alpha sont données par

$$\alpha_{12} = \alpha_4 + \sqrt{\alpha_8}40 \tag{IV-40}$$

Et

$$\alpha_{13} = \alpha_5 - \left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) \tag{IV-41}$$

Pour ces types de problèmes quant

$$\lim_{\alpha_{3\to 0}} P_n^{\alpha_{10}-1,\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3}-\alpha_{10}-1}(1 - 2\,\alpha_3 s) = L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11} s) \tag{IV-42}$$

Et

$$\lim_{\alpha_{R\to 0}} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12}-\frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} = e^{\alpha_{13} s} \tag{IV-43}$$

La solution donnée dans l'équation. (IV-40) devient

$$\Psi = s^{\alpha_{12}} e^{\alpha_{13} s} L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11} s) \tag{IV-44}$$

Dans certains cas, on est besoin d'une deuxième solution de l'équation. (IV-20). Dans ce cas, si la même procédure est suivie on utilise

$$k = -(\alpha_7 + 2\,\alpha_3\,\alpha_8) + 2\sqrt{\alpha_8\,\alpha_9} \tag{IV-45}$$

Cette solution devient

$$\Psi = s^{\alpha_{12}^*}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12}^* - \frac{\alpha_{13}^*}{\alpha_3}} P_n^{(\alpha_{10}^* - 1, \frac{\alpha_{11}^*}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1)}(1 - 2\alpha_3 s) \qquad \text{(IV-46)}$$

Et le spectre d'énergie est

$$\alpha_2 n - 2n\,\alpha_5 + (2n+1)\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) + n(n-1)\,\alpha_3 + \alpha_7 + 2\,\alpha_3\,\alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} + \alpha_5 = 0 \qquad \text{(IV-47)}$$

Les paramètres prédéfinis alpha sont les suivants :

$$\alpha_{10}^* = \alpha_1 + 2\,\alpha_4 - 2\sqrt{\alpha_8} \qquad \text{(IV-48)}$$

$$\alpha_{11}^* = \alpha_2 - 2\,\alpha_5 + 2\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) \qquad \text{(IV-49)}$$

$$\alpha_{12}^* = \alpha_4 - \sqrt{\alpha_8} \qquad \text{(IV-50)}$$

$$\alpha_{12}^* = \alpha_5 - \left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) \qquad \text{(IV-51)}$$

Les paramètres ξ_n .Et α_n de notre système sont

$$\xi_1 = \frac{mV_0}{2\hbar^2\alpha^2}, \xi_2 = \frac{m}{2\hbar^2\alpha^2}(E - V_0), \xi_3 = 0 \qquad \text{(IV-52)}$$

$$\alpha_1 = \frac{1}{2}\ ,\ \alpha_2 = \frac{3}{2},\ \alpha_3 = 1,\ \alpha_4 = \frac{1}{4},\quad \alpha_5 = -\frac{1}{4} \qquad \text{(IV-53)}$$

$$\alpha_6 = \frac{1}{16} + \frac{mV_0}{2\hbar^2\alpha^2},\ \alpha_7 = \frac{-mV_0}{2\hbar^2\alpha^2}(E - V_0) - \frac{1}{8} \quad , \alpha_8 = \frac{1}{16}, \alpha_9 = -\frac{m}{2\hbar^2\alpha^2}E$$

$$\alpha_{10} = \frac{3}{2}, \alpha_{11} = \frac{5}{2} + 2\sqrt{-\frac{mE}{2\hbar^2\alpha^2}},\ \alpha_{12} = \frac{1}{2}, \alpha_{13} = -\frac{1}{2} - \sqrt{-\frac{m}{2\hbar^2\alpha^2}E} \qquad \text{(IV-54)}$$

a-spectre d'énergie :

En substituant les paramètres α_n dans l'équation (IV-32), on obtient le spectre d'énergie :

$$E_n = \frac{-2\hbar^2\alpha^2}{m}\left[n + \frac{3}{4} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2\alpha^2} + \frac{1}{4}}\right]^2 \quad n = 0,1, \qquad \text{(IV-55)}$$

b-la fonction d'onde :

Pour obtenir la fonction d'onde, on utilise l'équation (IV-39) :

$$\Psi(x) = A_n th\alpha x(1-th^2\alpha x)^{\sqrt{\frac{-mE}{2\hbar^2\alpha^2}}} P^{\left(\frac{1}{2},2\sqrt{-\frac{mE}{2\hbar^2\alpha^2}}\right)}(1-2th^2\alpha x) \qquad \text{(IV-56)}$$

Telle que :

A_nLa constante de normalisation qui se détermine à partir de la

Condition :$\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x)|^2dx = 1$

On pose : $z = 1-2th^2\alpha x$

et on utilisant l'intégral par partie et la propriété suivante des Polynômes de Jacobi :

$$\int_{-1}^{+1}(1-z)^{\alpha-1}(1+z)^{\beta}\left[P_n^{(\alpha,\beta)}\right]^2 dz = \frac{2^{\alpha+\beta}\,\Gamma(\alpha+n+1)\Gamma(\beta+n+1)}{n!\alpha\Gamma(\alpha+\beta+n+1)} \qquad \text{(IV-57)}$$

Avec :

$$\beta = 2\left[n+\frac{3}{4}-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2\alpha^2}+\frac{1}{4}}\right]$$

On trouve :

$$A_n = \sqrt{\frac{n!\beta\Gamma(\beta+n+\frac{3}{2})}{\Gamma\left(n+\frac{3}{2}\right)\Gamma(\beta+n+1)}} \qquad \text{(IV-58)}$$

3-Solution de l'équation de Schrödinger non stationnaire :

3.1-introduction :

La résolution de l'équation de Schrödinger dans cette partie du travail nous permet d'étudier le mouvement quantique de potentiel non stationnaire , en passant par la méthode de séparation des variables et en trouvant le spectre d'Energie et les fonction d'ondes exactes pour le système étudié dont le début de son étude à travers l' hamiltonien, suivant :

$$H(x,t) = A(t)p^2 - \frac{C(t)}{Ch^2\alpha x} \qquad \text{(IV-59)}$$

$A(t)$ et $C(t)$. Sont des fonctions dépendantes du temps

$p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ La définition de l'operateur du moment conjugué

Nous essayerons de résoudre l'équation de Schrödinger non stationnaire suivante:

$$\left[A(t)\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{C(t)}{Ch^2\alpha x}\right]H(x,t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial x}H(x,t) \quad \text{(IV-60)}$$

L'étude du cas général de cet hamiltonien est très difficile, pour cela on a étudié seulement le cas spécial qui correspond à:

$$\frac{C(t)}{A(t)}=\gamma=const \quad \text{(IV-61)}$$

Dans ce cas, l'hamiltonien de notre système s'écrit:

$$H=A(t)(\,p^2-\frac{C(t)}{Ch^2\alpha x}\,) \quad \text{(IV-62)}$$

L'équation (IV-60) devient:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial x}H(x,t)=A(t)(\,p^2-\frac{C(t)}{Ch^2\alpha x}\,)H(x,t) \quad \text{(IV-63)}$$

On fait un changement de variables :

$$s=\int A(t)dt \quad \text{(IV-64)}$$

Donc

$$\frac{\partial}{\partial t}=A(t)\frac{\partial}{\partial s} \quad \text{(IV-65)}$$

Et

$$H(x,t)=H(x,s) \quad \text{(IV-66)}$$

Donc l'équation de Schrödinger dépanadent du temps âpres le changement de variables devient :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial s}H(x,s)=(\,p^2-\frac{\gamma}{Ch^2\alpha x}\,)H(x,s) \quad \text{(IV-67)}$$

On sépare les variables (x,s) :

$$H(x,s)=\varphi(x)f(s) \quad \text{(IV-68)}$$

L'application de la méthode de séparation des variables sur l'équation (IV-67), conduit à:

$$\frac{i\hbar}{f(s)}\frac{\partial f(s)}{\partial s}=\frac{1}{\varphi_n(x)}H_0(x)\varphi_n(x)=\varepsilon_n \quad \text{(IV-69)}$$

Avec ε_n const, et

$$H_0(x)=(\,p^2-\frac{\gamma}{Ch^2\alpha x}\,) \quad \text{(IV-70)}$$

Est un hamiltonien indépendant du temps.

Donc, nous obtenons les deux équations suivantes:

$$H_0(x)\varphi_n(x) = \varepsilon_n\varphi_n(x) \qquad \text{(IV-71)}$$

$$\frac{i\hbar}{f(s)}\frac{\partial f(s)}{\partial s} = \varepsilon_n \qquad \text{(IV-72)}$$

La solution de l'équation (V-72) donne:

$$f(s) = C_n e^{-\frac{i\varepsilon_n s}{\hbar}} \qquad \text{(IV-73)}$$

Où C_n est la constant de normalisation.

L'équation (V-71) devient:

$$\frac{d^2\varphi_n}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2}\left(\varepsilon_n + \frac{\gamma}{Ch^2\alpha x}\right)\varphi_n = 0 \qquad \text{(IV-74)}$$

Cette équation à la forme de l'équation (V-D2), avec :

$$m = \frac{1}{2} \quad , E = \varepsilon_n \, , \quad V_0 = \gamma \qquad \text{(IV-75)}$$

Donc, les valeurs propres deφ_n sont

$$\varepsilon_n = -4\hbar^2\alpha^2\left[n + \frac{3}{4} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\gamma}{\hbar^2\alpha^2} + \frac{1}{4}}\right]^2, \quad n = 1,2,3,\ldots\ldots \qquad \text{(IV-76)}$$

a- Le spectre d'énergie :

Le spectre d'énergie de l'hamiltonien (V-59) est :

$$E(t) = -4\hbar^2\alpha^2 A(t)\left[n + \frac{3}{4} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\gamma}{\hbar^2\alpha^2} + \frac{1}{4}}\right]^2 \qquad \text{(IV-77)}$$

b- La fonction d'onde :

La fonction d'onde de notre système est donnée par :

$$H(x,t) = C_n e^{-\frac{i\varepsilon_n}{\hbar}\int_0^t A(t')dt'} th\alpha x(1-th^2\alpha x)^{\sqrt{\frac{-\varepsilon_n}{4\hbar^2\alpha^2}}} P^{\left(\frac{1}{2},2\sqrt{-\frac{mE}{4\hbar^2\alpha^2}}\right)}(1-2th^2\alpha x) \qquad \text{(IV-78)}$$

Où C_n est la constante de normalisation qui est donnée par :

$$C_n = \sqrt{\frac{n!\,\beta\,\Gamma(\beta+n+\frac{3}{2})}{\Gamma\left(n+\frac{3}{2}\right)\Gamma(\beta+n+1)}} \qquad \text{(IV-79)}$$

Avec :

$$\beta = 2\left[n + \frac{3}{4} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\gamma}{\hbar^2\alpha^2} + \frac{1}{4}}\right]$$

On remarque que la fonction d'onde obtenue Pour le système non stationnaire contient une Phase dépendante du temps qui est donnée par:

$$\alpha' = 4\hbar^2\alpha^2\left[n + \frac{3}{4} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\gamma}{\hbar^2\alpha^2} + \frac{1}{4}}\right]^2 \int_0^t A(\boldsymbol{t}')dt'$$

. Cette phase représente la phase dynamique, donc la phase de Berry est nulle.

Références

Bibliographiques

[1] E. Schrödinger, "The non relativistic équation of the de Broglie waves," Ann. Physik 79(1926)361-376

[2] LewisHR Jr and RiesenfeldWB , An exact quantum theory of the timedependent harmonic oscillator and of a charged particle in a time-dependent electromagnetic field J. Math Phys. 10 (1969) 1458

[3] S. Menouar, Thèse de Doctorat ès Sciences, (Université de Sétif, 2009).

[4] P.M. Morse, Phys. Rev.34 (1929)57.

[5] Tezcan. C. ,Sever. R, Int. J Theor Phys. 48 (2009) 337 .

[6] Goldstein, Université Libre de Bruxelles Faculté des Sciences Appliquées Année académique (2002-2003).

[7] L. Krache, Thèse de Doctorat, (Université de Sétif, 2010).

[8] D.Blokhintsev, Principe de mécanique quantique, Traduit du russe en français (1981) par S.Medvedev, Édition Mir-Moscou

[9] L. Landau et E. Lifchitz, mécanique quantique, edition mir 1975.

[10] Boucheriha.H.'Introduction à la physique quantique'.Centre de publication universitaire : Tunis.(2002).

[11] - Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics , Vol 1,2 .

[12] A.M. Markov, Invariant and the Evolution of Non stationary Quantum Systems, (New York, 1989)

[13] Lewis HR Jr and Riesenfeld WB 1969 J. Math. Phys. 10 1458.

[14] A.F.Nikiforov, and V.B.Ovarov, special Functions of Mathematical Physics

[15] Etude des niveaux énergétiques des molécules diatomiques via Le Potentiel de Morse . Université de saide.Dr. Moulay tahar(2019)

[16] La solution exacte de l'équation de Schrödinger stationnaire et non stationnaire pour le potentiel hyperbolique. Université mohamed Boudiaf – M'sila (2018)

الملخص:

في هذا العمل قمنا بحل معادلة شرودنغر للكمون في حالته العامة الغير المحددة مستقرا كان او غير مستقر من ثم حلها لكمون زائدي أحادي البعد و كمون مورس في الحالتين المتعلقة و الغير متعلقة بالزمن لكليهما و هذا باستعمال طرق محددة لدراسة كل كمون منها

-بالنسبة للكمون الزائدي استعملنا طريقة نيكيفوروف ايفاروف لتحويل معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية الى معادلة من الشكل الفوق الهندسي في الحالة المستقرة و طريقة فصل المتغيرات في الحالة الغير المستقرة و بالتالي الوصول الى الشكل النهائي لدوال الموجات.

-اما لدراسة كمون مورس فقد استعملنا نفس طريقة نيكيفوروف ايفاروف في الحالة المستقرة للوصول الى دوال الموجات و طيف الطاقة اما في الحالة الغير المستقرة فقد مررنا بتغييرالمتغيرات و المرور ايضا بالطريقة المباشرة و الاستعانة بكثيرات حدود لاغار .

كلمات مفتاحيه :

معادلة شرودنجر طريقة نيكيفوروف ايفاروف كمون زائدي كمون مورس دوال الموجات طيف الطاقة

Résumé :

Dans ce travail, nous avons résolu l'équation de Schrödinger pour un potentiel dans son état général indéfini, qu'il soit stationnaire ou non stationnaire , puis nous la résolvons pour un potentiel hyperbolique unidimensionnel et le potentiel de Morse dans les deux cas dépendant et indépendant du temps, en utilisant des méthodes pour étudier chaque potentiel.

- Pour le potentiel hyperbolique, nous avons utilisé la méthode de Nikiforov-Ivarov pour convertir une équation différentielle du second ordre à une équation hypergéométrique dans le cas stationnaire et la méthode de séparation des variables dans le cas non stationnaire , aboutissant ainsi à la forme finale des fonctions d'onde.

- Quant à l'étude du potentiel Morse, nous avons utilisé la même méthode de Nikiforov Ivarov dans le cas non stationnaire pour atteindre les fonctions d'onde et le spectre d'énergie. Dans le cas non stationnaire, nous sommes passés par le changement de variables et par la méthode directe en utilisant les polynômes de Laguerre.

Mots clés :

Équation de Schrödinger, méthode d'Ivarov, méthode de Nikiforov, potentiel hyperbolique, potentiel de Morse, fonctions d'onde, spectre d'énergie.

Abstract:

In this work, we have solved Schrödinger's equation for a potential in its general undefined state, whether it is stable or unstable, and then solve it for a one-dimensional hyperbolic potential and Morse's potential in both cases related and unrelated to time, using specific methods to study each potential.

-For the hyperbolic potential, we used Nikiforov Ivarov's method for converting a second-order differential equation into a hypergeometric equation in the steady state and the method of separating the variables in the unstable state, thus arriving at the final form of the wave functions.

- As for the study of the Morse potential, we used the same method of Nikiforov Ivarov in the steady state to reach the wave functions and the energy spectrum. In the unstable state, we went through changing the variables and going through the direct method and using Lagar polynomials.

Keywords:

Schrödinger equation, Ivarov method, Nikiforov method, hyperbolic potential, Morse potential, wave functions, energy spectrum.