REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministre de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Université de Médéa

Faculté des sciences

Mémoire

Présenté pour l'obtention du diplôme :

Master en physique

Spécialité :physique théorique

Par :

Chamekh Karim

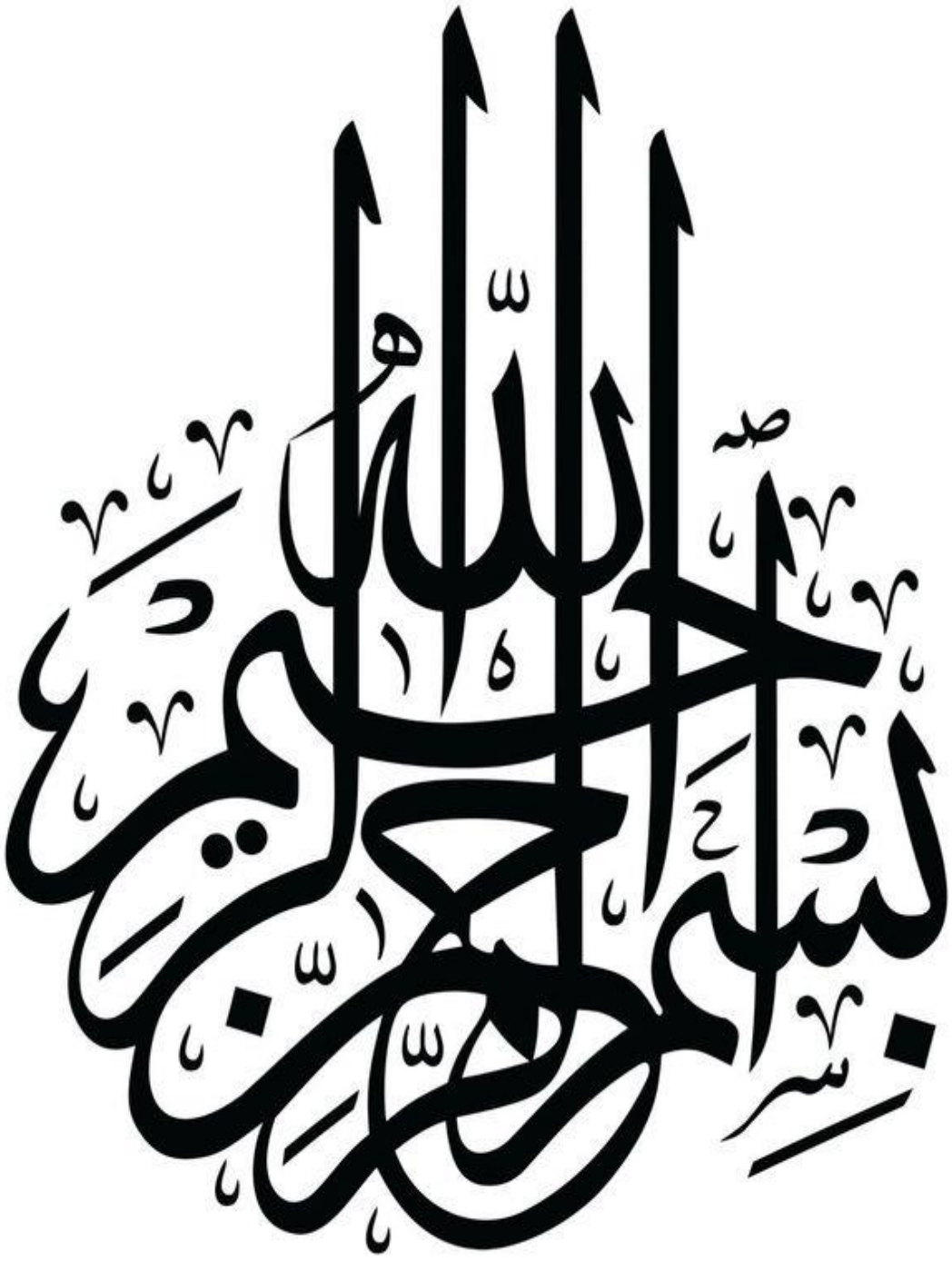
Thème :

La fonction de distribution d Wigner pour les polynômes orthogonaux

Devant le jury composé de :

Dr. Bouchachia Karim	Grade: MCB	UYF. Médéa	Président
Dr. Ahmed Ammar Mohamed	Grade: MCA	UYF. Médéa	Examinateur
Mme Hattou Souad	Grade: MAA	UYF. Médéa	Examinatrice
Dr. Cherroud Othmane	Grade: MCB	UYF. Médéa	Encadreur

Année universitaire : 2021/2022


بسم الله الرحمن الرحيم

Remerciement

Je remercie Dieu tout puissant de m'avoir donné le courage, la santé, la patience jusqu'à l'achèvement de ce mémoire

Je tiens, avant tout, à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur:

Dr. O. Cherroud, mon promoteur. Je le remercie pour sa gentillesse et sa disponibilité, j'ai eu le grand plaisir de travailler sous sa direction

Mes remerciements à tous les membres de jury qui ont acceptés de juger Ce travail et d'y apporter leurs cautions

Mes remerciements vont également à tous les enseignants du Département de physique surtout : Messieurs les docteurs

Dr. K. Bouchachia, **Dr. M. Ahmed Ammar**, **Dr. S. Hattou,**

Dr. D. Houatis et monsieur le professeur H. Zitouni.

Dédicace

Je dédie ce travail à mes parents, pour leur encouragement et leur aide et soutien et surtout les sacrifices qu'ils ont fait pour nous voir réussir

Résumé

Le présent travail est pour le but de construire numériquement et analytiquement les fonctions de distribution de Wigner pour deux états propres différents qui sont des fonctions d'Hermite et de Laguerre généralisées. Ces derniers sont liés à des solutions de l'équation de Schrödinger avec une masse dépendante de la position via une transformation de cordonnées. Nous avons obtenu analytiquement et numériquement les valeurs moyennes des opérateurs de position et d'impulsion à l'aide d'une fonction caractéristique afin de vérifier la relation d'incertitude de Heisenberg.

ملخص

الهدف من هذا العمل هو بناء دالة التوزيع لفيغنر تحليليا و رقميا لحالتين مختلفتين من دوال الموجة المعبر عنهما بكثيرات حدود لهرميت و لاجير المعممة. هذه الاخيرة هي حلول لمعادلات شرودنغر مع كتلة مرتبطة بالموضع منطوية تحت طريقة تحويل الاحداثيات. بواسطة هذه الاخيرة تمكنا من ايجاد القيم المتوسطة لموثرات الموضع و كمية الحركة بواسطة الدالة المميزة ما سمح لنا بالتحقق من علاقة الارتياب لهيزنبرغ

Abstract

The present work is for the numerical and analytical construction of the Wigner distribution function for two different eigenstates which are generalized Hermite and Laguerre functions. The latter are related to solutions of the Schrödinger equation with position-dependent mass via a coordinate transformation. We obtained analytically and numerically the mean values of position and momentum operators using a characteristic function in order to verify the Heisenberg uncertainty relation.

Tables des matières

Introduction générale 01

Chapitre 1 : la résolution de l'équation de Schrödinger avec une masse dépendante de la position via la méthode de transformation des cordonnées

1.1. Introduction ……..…04

1.2.Transformation des coordonnées, solutions exactes de l'équation de Schrödinger Avec une masse effective dépendante de la position…….. 05

1.3. Résolution de l'équation de Schrödinger avec une masse effective dépendante De la position et ces solutions…… …….08

1.3.1. Cas de polynôme d'Hermite …… 08

1.3.2. Cas de polynôme de Laguerre généralisée ……..10

Chapitre 2 : la forme alternative de la mécanique quantique dans l'espace des phases

2.1. Introduction …….. 16

2.2. La fonction de distribution de Wigner …….. 16

2.2.1 Les propriétés de la fonction de distribution de Wigner …….. 20

2.3. Transformation de Weyl dans l'espace des phases ……. 21

2.3.1 L'expression de la valeur moyenne ……. 23

2.4. Produit de Moyal …… 26

2.5. Fonction caractéristique via la transformation de Fourier…….. 27

Chapitre 3 : La fonction de distribution de Wigner pour les polynômes d'Hermite et de Laguerre généralisée

3.1. Introduction…….. 31
3.2. La fonction de distribution de Wigner……. 31
3.2.1 : la fonction de distribution de polynôme de Laguerre généralisées …… 31
3.2.2 : la fonction de distribution de Wigner pour le polynôme d'Hermite……. 37
3.3 Les expression des valeurs moyenne via la fonction caractéristique …… 41
Conclusion générale …… 44

Introduction générale

La relation entre la mécanique quantique et la mécanique classique a été introduite par E. Wigner en 1932 [1], en construisant la fonction de distribution dans l'espace des phases à l'aide des états quantiques. Les observables du système quantique $\widehat{A}$ dans l'espace de Hilbert sont quant à elles, de simples fonctions à deux variables $A(x, p)$ sur l'espace des phases.

L'objectif de ce travail est de donner une présentation plus ciblée sur ce sujet, en examinant la relation entre la physique quantique et la physique classique. Cela concerne l'étude des états propres qui sont fonctions des polynômes d'Hermite et de Laguerre généralisés, visualisée via les fonctions de distribution de Wigner.

Ce manuscrit se compose de trois chapitres. Dans le premier, une analyse de certaines fonctions d'ondes, de polynômes orthogonaux, qui sont des solutions des équations différentielles du second ordre et résultant de l'équation de Schrödinger avec une masse effective dépendante de la position. Cette analyse est menée, en utilisant la méthode de transformation canonique (CT) [2], et en choisissant certaines conditions convenables. Par la suite, nous allons étudier ces conditions proposées, qui mènent aux fonctions d'ondes des polynômes orthogonales souhaitées, au moyen desquels, on trouve les potentiels et les valeurs propres, des énergies appropriées.

Dans le deuxième chapitre nous allons exposer les concepts de base du formalisme de la fonction de Wigner. En premier lieu nous allons introduire le concept de l'opérateur densité qui va nous permettre par la suite de définir la fonction de Wigner. Ensuite, nous allons établir quelques propriétés fondamentales de cette distribution, à savoir les densités de probabilité marginale correspondante aux variables position x et impulsion p.

En outre, la transformation de Weyl qui permet, entre autres, de faire correspondre à chaque observable une fonction définie dans l'espace des phases. Ou bien le passage entre les opérateurs quantiques et les fonctions correspondantes dans l'espace de phase à l'aide d'une transformation de Weyl [3]. Ainsi la fonction caractéristique permet d'exprimer les valeurs moyennes, des opérateurs quantiques dans une forme très similaire, à celles des valeurs moyennes des fonctions dans l'espace des phases. Ainsi, le formalisme du produit de Moyal [4] a été basé étroitement sur la correspondance entre le produit des deux opérateurs quantiques, dans l'espace de Hilbert et le produit de Moyal des fonctions dans l'espace des phases.

Dans le troisième chapitre on construit analytiquement et numériquement, les fonctions de distribution de Wigner, pour deux états propres différents, qui sont fonctions des polynômes d'Hermite et de Laguerre généralisés, relatifs aux potentiels d'oscillateur harmonique, potentiel de Morse de coulomb et le potentiel d'oscillateur harmonique à trois dimensions . On utilise aussi la transformation de Weyl sur les opérateurs quantiques. On obtient analytiquement dans les deux cas précédents, les valeurs moyennes des observables quantiques de couple (x, p) à l'aide de la fonction caractéristique et afin de vérifier la relation d'incertitude de Heisenberg.

Finalement, nous terminons ce mémoire par une conclusion générale dans laquelle on résume l'essentiel des résultats de notre travail, puis les perspectives futures pour élargir les études existantes dans les autres polynômes orthogonaux.

.

Chapitre 1:

Résolution de l'équation de Schrödinger avec une masse dépendante de la position via la méthode de transformation des cordonnées

1.1 Introduction:

L'étude des systèmes quantiques avec une mass dépendante de la position (MDP) est devenue parmi l'un des sujets les plus actifs, surtout dans ces dernières années [5-18].Ces systèmes ont de nombreuses applications dans divers domaines (dans la physique de la matière condensé, la physique nucléaire, la théorie des semi-conducteurs. Dans la recherche théorique, des nombreuses méthodes ont été développées dans l'étude des systèmes avec une masse constante, ces méthodes ont été généralisées sur les systèmes avec une MDP, ont permis d'obtenir des résultats intéressants. Parmi ces recherches, la recherche de la solution de l'équation des ondes quantiques (équation de Schrödinger, Dirac er de Klein Gordan).Ces systèmes avec une masse constante peuvent être résolus avec différentes méthodes, on compte: la méthode de factorisation[19 ,20], méthode d'opérateur, méthode de transformation des cordonnées, l'approche de l'algèbre de lie [21-23] etc. Ce dernier a ensuite évolué pour inclure des systèmes avec MDP.

La méthode de transformation des cordonnées pour l'équation de Schrödinger avec une masse dépendante de la position, et nous obtenons ces solutions avec des différent potentiels. La méthode de transformation des cordonnées, présente de nombreux avantages et objectifs : le premier concerne la résolution de l'équation de Schrödinger avec différentes types de potentiel comme le potentiel de Coulomb, l'oscillateur harmonique, Rosen-Morse et le potentiel de Scarf généralisé. Le deuxième est de transformer l'équation de Schrödinger a une équation différentielle de deuxième ordre qui a des solutions sous forme des fonctions spéciales telles que les fonctions hypergéométriques et fonctions hypergéométriques confluentes, et ainsi peut fourni des études systématiques aux solutions exactes de l'équation de Schrödinger. En plus de l'invariance de la forme, la méthode de transformation des coordonnées fournit une méthode importante pour la classification des potentiels résolubles.

Ce chapitre est organisé comme suit : nous développerons dans la section (1), la méthode de la transformation des coordonnées (CT), qui introduit des solutions exactes de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle avec une masse effective dépendante de la position (PDEM). Dans les sous sections (1.2) et (1.3) seront données pour plusieurs potentiels, les valeurs propres des énergies et les fonctions propres de ces systèmes qui peuvent être exprimées en termes des polynômes d'Hermite et de polynômes de Laguerre généralisés dans le cas d'une masse effective dépendante de la position. Enfin nous calculerons par la suite, toutes les constantes de normalisations pour les différents cas possibles de polynômes de Laguerre généralisée et de Hermite pour les deux types de la masse (constantes ou variables).

1.2. Transformation des coordonnées, solutions exactes de l'équation de Schrödinger avec une masse effective dépendante de la position

La forme la plus générale de l'opérateur d'hamiltonien unidimensionnel pour un système doté d'une masse effective dépendante de la position a été proposée par O. Von Roos **[24]**, comme suit

$$\widehat{H}(\hat{x},\hat{p}) = \frac{1}{4}\left(M^{\alpha}(\hat{x})\hat{p}\, M^{\beta}(\hat{x})\hat{\vec{p}}M^{\gamma}(\hat{x}) + M^{\gamma}(\hat{x})\hat{\vec{p}}\, M^{\beta}(\hat{x})\hat{p}M^{\alpha}(\hat{x})\right) + V(\hat{x}), \qquad (1.1)$$

Les constantes arbitraires α, β et γ, sont connues sous le nom des paramètres d'ambiguïté de O.Von Roos, qui ont été proposés en se basant sur des considérations physiques particulières aux problèmes étudiés. Ils sont liés par la contrainte suivante

$$\alpha + \beta + \gamma = -1. \qquad (1.2)$$

Sachant que le choix des paramètres de Von Roos, pour les opérateurs d'énergie cinétique doit être limité, il existe donc plusieurs formes pour définir l'opérateur d'énergie cinétique du système quantique [25],qui assurent de retrouver la forme conventionnelle de l'opérateur de l'énergie cinétique au cas de la masse constante.

Dans ce chapitre nous avons utilisé la forme de l'énergie cinétique proposée par BenDaniel et Duke [26].Pour cela, il est nécessaire d'exiger la condition suivante $\alpha = \gamma = 0$, et qui implique que $\beta = -1$. Donc l'hamiltonien avec une masse dépendante de la position $M(\hat{x})$au casdu système unidimensionnel, avec une énergie potentiel $V(\hat{x})$, est donné par:

$$\widehat{H} = \hat{p}\frac{1}{2M(\hat{x})}\hat{p} + V(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\frac{d}{dx}\frac{1}{m(\hat{x})}\frac{d}{dx}\right] + V(\hat{x}), \qquad (1.3)$$

Sachant que m_0 est masse constante et $m(\hat{x})$ est une masse sans dimension dépendante de la position. Nous utilisons le système des unités naturel($m = \hbar = 1$), donc l'Hamiltonien de l'équation (1.3) est réduit par :

$$\widehat{H} = -\frac{1}{2m(x)}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)}\frac{d}{dx} + V(x), \qquad (1.4)$$

m' représente le premier dérivé de $m(x)$par rapport à la position x .l'équation de Schrödinger avec une MDP correspondante a l'Hamiltonien (1.4) s'écrit comme :

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{m'}{m}\frac{d\psi(x)}{dx} + 2m[E - V(x)]\psi(x) = 0\,, \tag{1.5}$$

Où E est l'énergie relative à la fonction d'onde$\psi(x)$.

Maintenant nous appliquons la méthode de transformation des cordonnées (TC) suivante pour les fonctions propres $\psi(x)$dans l'équation (1.5)[2, 27].

$$\psi(x) = f(x)F\big(g(x)\big)\,, \tag{1.6}$$

Sachant que $F(g)$ est un polynôme de la fonction spéciale satisfait l'équation différentielle de second ordre suivante :

$$\frac{d^2F}{dg^2} + Q(g)\frac{dF}{dg} + R(g)F(g)\,, \tag{1.7}$$

$Q(g)\,et\;R(g)$Dans l'Équation (1.7)sont déterminés à partir des certains types de fonctions spéciales $F(g)$. Dans ce chapitre nous allons traiter deux types de fonction spéciale.

En substituant l'équation (1.6)dans l'équation (1.5) on obtient donc l'équation différentielle du second ordre suivante :

$$\frac{d^2F}{dg^2} + \left[\frac{g''}{(g')^2} + \frac{2f'}{fg'} - \frac{m'}{mg'}\right]\frac{dF}{dg} + \left[\frac{f''}{f(g')^2} - \frac{m'f'}{mf(g')^2}\frac{2m[E - V(x)]}{(g')^2}\right]F = 0 \tag{1.8}$$

On compare les deux équations$(1.7)et(1.8)$, on peut avoir les deux relations suivantes :

$$Q(g) = \frac{g''}{(g')^2} + \frac{2f'}{fg'} - \frac{m'}{mg'} \tag{1.9}$$

et

$$R(g) = \frac{f''}{f(g')^2} - \frac{m'f'}{mf(g')^2}\frac{2m[E - V(x)]}{(g')^2} \tag{1.10}$$

A partir de ces équations $(1.9)\ et\ (1.10)$ on a :

$$\frac{f'}{f} = \frac{1}{2}\left(Q(g) - \frac{g''}{g'} + \frac{m'}{m}\right) \tag{1.11}$$

Et

$$E - V(x) = \frac{(g')^2}{2m}\left[R(g) - \frac{1}{2}\frac{dQ}{dg} - \frac{1}{4}Q^2\right] + \frac{1}{4m}\ G(g') - G(m) \tag{1.12}$$

Tel que : $G(z) = (z''/z) - (3/2)(z'/z)^2$. Nous faisons l'intégration sur l'équation (1.11)on obtient la fonction de transformation par la forme suivante:

$$f(x) = \sqrt{\frac{m'}{g}}\exp\left(\frac{1}{2}\int^{g(x)} Q(g)\ dg\right) \tag{1.13}$$

L'équation de Schrödinger avec une MDP a donné une solution exacte selon les formes spécifiques des fonctions $R(g)\ et\ Q(g)$ (ou les types de fonction spéciale $F(g)$ sont données pour chaque couple des fonctions $Q\big(g(x)\big)$et $(g(x))$. La partie droite de l'équation (1.12) peut être scindé en deux parties : la première dépend seulement du nombre quantique$n$qui est représenté la valeur propre de l'énergie E de système, et l'autre partie dépend uniquement à la position x et représente le reste terme de potentiel $V(x)$ du système.

Dans le présent chapitre on prend la fonction spéciale $F(x)$comme étant les polynômes d'Hermite ou de Laguerre généralisée, on obtient un système soluble avec une fonction d'onde $\psi(x)$, une valeur propre de l'énergie Eet un potentiel $V(x)$.et pour faire les choses de propositions de la masse nous définissons la fonction auxiliaire suivante :

$$\mu(x) = \int^{x} \sqrt{m(x)}\ dx \tag{1.14}$$

Le terme $G(g')$dans l'équation (1.12)peut être réécrit en terme de $\mu(x)$ comme suit :

$$G(g')\ = G(\mu')\ + (\mu')^2\ G\ \left(\frac{dg}{d\mu}\right) \tag{1.15}$$

Tel que :

$$G\left(\frac{dg}{d\mu}\right)=\left(\frac{d^3g}{d\mu^3}\Big/\left(\frac{dg}{d\mu}\right)\right)-\frac{3}{2}\left[\frac{d^2g}{d\mu^2}\Big/\left(\frac{dg}{d\mu}\right)\right]^2 \qquad (1.16)$$

Qui se réduisent à être le terme $G(g')$pour une masse constante. Notons que les deux équations $(1.12)\ et\ (1.15)$montrent qu'Il ya un nouveau terme $1/4mG(g')-G(m)$ et un facteur supplémentaire $1/m$ dans chaque terme comparé à celui du système constant.[2].si $m$dépend seulement de la cordonné x le terme $1/4mG(g')-G(m)$ sera regroupé dans le potentiel $V(x)$. En ce sens, le MDP induit une interaction efficace entre les particules du système, ce qui est compatible avec le concept de masse effective dans la physique de la matière condensée et d'autres domaines de la physique. Nous désignerons le potentiel complémentaire $V_m$au cas d'une masse variable comme suit :

$$V_m\ =\frac{1}{4m}\,G(g')-G(m)=\frac{1}{8m}\left[\frac{m''}{m}-\frac{7}{4}\left(\frac{m'}{m}\right)^2\right] \qquad (1.17)$$

Qui est attribué à la dépendance de la masse *m* sur *x*.

1.3. Résolution de l'équation de Schrödinger avec une masse effective dépendante de la position et ces solutions *:* Maintenant nous essayons de résoudre l'équation de Schrödinger selon les expressions spécifiques des fonctions $Q(g(x))$et $R(g(x))$avec une MDP et aussi présentons leurs fonctions d'onde, l'énergie et les potentiels de système physique pour les cas suivants :

1.3.1. Cas de polynôme d'Hermite :

Lorsque (g) dans l'équation (1.7) est le polynôme d'Hermite c'est à dire $F(g)=H(g)$, donc les deux équations $Q(g)\ et\ R(g)$ sont prennent les formes suivantes [2].

$$Q(g)=\ -2g \qquad R(g)=2n \qquad (n=1,2,3.,.,..) \qquad (1.18)$$

Pour ces valeurs de $Q(g)\ et\ R(g)$ l'équation (1.12)devient :

$$E-V(x)=\frac{(g')^2}{2m}(2n+1-\ g^2)\ +\frac{1}{4m}(\ G(g')-G(m)\ ) \qquad (1.19)$$

D'après l'équation (1.19), Il y a deux cas possibles pour nous pouvons obtenir le potentiel et les états propres d'énergie.

Cas 1 : si la fonction $g(x)$ satisfait l'équation

$$\frac{(g')^2}{m}=\omega \qquad (1.20)$$

Le terme ω étant positive, on obtient directement

$$g(x)=\ \sqrt{\omega}\,\mu(x)\,. \qquad (1.21)$$

En substituent l'équation (1.21)dans l'équation (1.19) on obtient les valeurs propres de l'énergie et le potentiel de ce système par les deux relations suivantes

$$E_n = n\omega \tag{1.22a}$$

Et

$$V(x) = -\frac{1}{2}\omega + \frac{1}{2}\omega^2[\mu(x)]^2 + V_m \tag{1.22b}$$

À partir des équations (1.21) , (1.18), (1.13)on obtient l'équation de transformation $f(x)$ comme suit :

$$f(x) = [(m(x))]^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2}g^2\right) \tag{1.23}$$

Donc la fonction d'onde associée à ce système avec le potentiel dans l'équation $(1.22b)$ est donnée par

$$\psi(x) = N_n^{\mathcal{H},1}[(m(x))]^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2}g^2\right) H(g) \tag{1.24}$$

Où $N_n^{\mathcal{H},1}$ est la constante de normalisation de la fonction d'onde relative au premier cas d'Hermite.
Si $m(x) = 1$ l'équation $(1.22a)$ et (1.24) se réduisent respectivement au potentiel et la fonction d'onde de l'oscillateur harmonique.

- **Cas 2 :** si la fonction $g(x)$ satisfait l'équation :

$$\frac{(g')^2}{m}g^2 = \frac{4\omega^2}{(2n+1)^2} \tag{1.25}$$

Où le terme $\omega > 0$. On obtient facilement

$$g(x) = \sqrt{\frac{4\omega}{2n+1}}[\mu(x)]^{1/2} \tag{1.26}$$

On remplace l'équation (1.26) dans (1.19)on obtient respectivement l'énergie et le potentiel :

$$E_n = 2\omega^2 - \frac{2\omega^2}{(2n+1)^2} \tag{1.27}$$

Et

$$V(x) = 2\omega^2 - \frac{\omega}{2}[\mu(x)]^2 - \frac{3}{32}[\mu(x)]^{-2} + V_m \tag{1.28}$$

Par conséquent la fonction d'onde de ce système est donnée par

$$\psi(x) = N_n^{\mathcal{H}2}[m(x)\mu(x)]^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2}g^2\right) H(g) \tag{1.29}$$

Où $N_n^{\mathcal{H}2}$ est une constante de normalisation de la fonction d'onde pour le deuxième cas d'Hermite.

1.3.2. Cas de polynôme de Laguerre généralisée :

Lorsque $F(g)$ dans l'équation (5) peut-être un polynôme de Laguerre c'est-à dire $F(g) = L_n^{\alpha}(g)$ alors les deux équations $Q(g)\ et\ R(g)$ dans l'équation (5) prenant les formes suivantes[2].

$$Q(g) = \frac{\alpha+1}{g} - 1 \quad , \quad R(g) = \frac{n}{g} \quad , (n = 0,1,2,3, \dots ; \ \alpha \neq -1, -2, -3, \dots) \tag{1.30}$$

En substituant l'équation (1.30) dans (1.12) on obtient la relation suivante:

$$E - V(x) = \frac{(g')^2}{4mg}(2n + \alpha + 1) + \frac{(g')^2}{2mg^2}\left[\frac{(\alpha+1)}{2} - \frac{(\alpha+1)^2}{4}\right] - \frac{(g')^2}{8m} + \frac{1}{4m}(G(g') - G(m)) \tag{1.31}$$

On obtient les trois cas possibles suivants

- **Cas 1** : Si la fonction $g(x)$ satisfait l'équation :

$$\frac{(g')^2}{mg} = 4\omega \, , \quad \omega > 0 \tag{1.32}$$

Implique que :

$$g(x) = \omega[\mu(x)]^2 \tag{1.33}$$

En substituant cette dernière équation dans l'équation (1.31) on obtient alors l'énergie et l'expression de potentiel de ce système :

$$E_n = 2n\omega \tag{1.34a}$$

$$V(x) = -\left(l + \frac{3}{2}\right)\omega + \frac{1}{2}\omega^2[\mu(x)]^2 + \frac{1}{2}\frac{l(l+1)}{[\mu(x)]^2} + V_m \tag{1.34b}$$

Sachant que :

$$l = \alpha - \frac{1}{2} \ , \ \left(l \neq -\frac{3}{2}, -\frac{5}{2}, -\frac{7}{2} \dots\right) \tag{1.35}$$

Avec l'équation de transformation dans ce cas est donnée par :

$$f(x) = [m(x)]^{1/4}[\mu(x)]^{l+1} \exp\left(-\frac{1}{2}\omega\,\mu(x)^2\right) \tag{1.36}$$

Et la fonction d'onde de ce système est donnée à partir des deux équations $(1.6) et (1.36)$ par :

$$\psi(x) = N_n^{\mathcal{L}1}[m(x)]^{1/4}[\mu(x)]^{l+1} \exp\left(-\frac{1}{2}\,\mu(x)^2\right) \times L_n^{(l+1/2)}(\omega\mu(x)^2) \tag{1.37}$$

Où $N_n^{\mathcal{L}1}$ est une constante de normalisation de la fonction d'onde dans le premier cas de Laguerre.

Si $l = 0, 1, 2, \cdots$ alors l est considéré comme un nombre quantique représentant le moment angulaire. L'équation (1.34 a) est l'énergie propre d'un oscillateur harmonique à trois dimensions [2].

Lorsque $m(x) = 1$, les équations (1.34b) et (1.37) se réduisent respectivement au potentiel et à la fonction d'onde de l'oscillateur harmonique iso-tropique tridimensionnel [2].

De même on obtient les deux restes cas de polynômes de Laguerre généralisées comme

- **Cas 2 :** on pose

$$g(x) = \exp\big(-a\mu(x)\big)\ , a \neq 0 \tag{1.38}$$

En suivant les mêmes étapes, alors les valeurs propres de l'énergie et le potentiel du système ont pour expressions

Les valeurs propres de l'énergie :

$$E_n = \frac{1}{2}a^2s^2\ -\frac{1}{2}a^2(s-n)^2 \tag{1.39a}$$

Le potentiel :

$$V(x) = \frac{1}{2}a^2s^2 + \frac{a^2}{8}\exp[-2a\mu(x)] - \frac{1}{4}a^2\exp[-a\mu(x)] + V_m \tag{1.39b}$$

La fonction propre : à partir des équations $(1.6), (1.13), (1.30) et (1.38)$:

$$\psi(x) = N_n^{\mathcal{L}2}[m(x)]^{1/4}\exp[(n-s)a\mu(x)]\exp\left[-\frac{1}{2}e^{-a\mu(x)}\right] \times L_n^{(2s-2n)}\big(e^{-a\mu(x)}\big), \tag{1.40}$$

Où $N_n^{\mathcal{L}2}$ est une constante de normalisation, lorsque $m\,(x) = 1$ ce système est réduit au potentiel de Morse

- **Cas 3 :** lorsque

$$\frac{(g'(x))^2}{m(x)} = 4\omega^2, \tag{1.41}$$

Ce qui implique

$$g(x) = 2\omega\mu(x),\ \omega > 0 \tag{1.42}$$

On obtient respectivement la valeur propre de l'énergie et le potentiel du système :

$$E_{n,l} = \frac{a^2}{2(l+1)^2} - \frac{a^2}{2(n+l+1)^2} \tag{1.43a}$$

Le potentiel :

$$V(x) = \frac{a^2}{2(l+1)^2} - \frac{a}{\mu(x)} + \frac{l(l+1)}{2\mu(x)^2} + V_m \tag{1.43b}$$

En suite la fonction de transformation est donnée par

$$f(x) = [m(x)]^{1/4}(\mu(x))^{l+1} \exp\left[-\frac{a}{n+l+1}\,\mu(x)\right] \tag{1.44}$$

Avec la fonction d'onde suivante :

$$\psi(x) = N_n^{\mathcal{L}3}[m(x)]^{1/4}\big(\mu(x)\big)^{l+1} \exp\left[-\frac{a}{n+l+1}\,\mu(x)\right] \times L_n^{(2l+1)}\left(\frac{2a}{n+l+1}\,\mu(x)\right), \tag{1.45}$$

Où $N_n^{\mathcal{L}3}$ est la constante de normalisation de la fonction d'onde pour le troisième cas de Laguerre.

Si $a = Z$ (Z est le nombre de charges de la particule), $l = 0, 1, 2, \ldots$, alors l est considéré comme un nombre quantique du moment angulaire. Ce cas est indiqué au potentiel Coulombien tridimensionnel.

Lorsque $m(x) = 1$, est représenté le cas du potentiel de Coulomb tridimensionnel [2] pour plus de détaille voir [28].

Maintenant on détermine les constantes de normalisation pour chacun cas des polynômes de Laguerre et d'Hermite.

a) Polynôme de Laguerre :

- **Cas 1 :**

La fonction d'onde du premier cas de polynôme de Laguerre est donnée par l'équation (1.37).

La constante de normalisation est déterminée par l'utilisation de la relation de l'orthogonalité suivante :

$$\psi_n(x)\psi_m(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n{}^*(x)\psi_m(x)\ dx = \delta_{nm}, \tag{1.46}$$

le δ_{nm}, représente le symbole de Kronecker qui vaut

$$\begin{cases} 1\ si\ \ n = m \\ 0\ si\ \ n\ \ \neq m \end{cases}$$

Lorsque la masse constante implique que

$$m(x) = 1\ , \tag{1.47}$$

La fonction de masse auxiliaire $\mu(x)$ est déterminé à partir de l'équation (1.14) : on obtient

$$\mu(x) = x \tag{1.48}$$

On substituant les équations $(1.48), (1.47), (1.37)$dans l'équation (1.46)on obtient :

$$\psi_n(x)\psi_m(x) = (N_n^{\mathcal{L}1})^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2l+2} e^{-x^2} L_n^{(l+1/2)}(x^2) L_n^{(l+1/2)}(x^2) \tag{1.49}$$

En faisant le changement de variable suivant :

$$\begin{cases} y = x^2\ , dy = 2xdx\ , dx = \dfrac{dy}{2x} \\ y \in 2\,[\,0\,, \infty] \\ x \in [-\infty\,, +\infty] \end{cases}$$

Equation(1.49)devient :

$$\psi_n(x)\psi_m(x) = 2(N_n^{\mathcal{L}1})^2 \int_0^{\infty} y^{l+1}\, e^{-y} L_n^{(l+1/2)}(y) L_n^{(l+1/2)}(y) \frac{1}{2y^{1/2}}\ \ dy = 1 \tag{1.50}$$

On utilise la relation de la référence [29] donnée par :

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha} L_n^{\alpha} x\ (x) L_m^{\alpha}\ (x) = \frac{\Gamma\ (\alpha + n + 1)}{n!}\ \ , si\ \ n = m\ \ , avec\ Re\ \alpha\ > 0 \tag{1.51}$$

Alors l'intégrale de l'équation (1.50) vaut :

$$N_n^{\mathcal{L}1} = \sqrt{\frac{n\,!}{\Gamma\ (l + n + \frac{3}{2})}} \tag{1.52}$$

Finalement, la fonction d'onde du premier cas de polynôme de Laguerre d'une masse constante est présentée par l'expression suivante :

$$\psi_L^1(x) = \sqrt{\frac{n\,!}{\Gamma\ (l + n + \frac{3}{2})}}\, x^{l+1} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)\ \times\ L_n^{(l+1/2)}(x^2) \tag{1.53}$$

En suivant les mêmes étapes pour le deuxième cas de polynôme de Laguerre

Cas 2 : Le constante de normalisation pour le deuxième cas de polynôme de Laguerre est donnée par :

$$N_n^{\mathcal{L}2} = \sqrt{\frac{2\,n!\,(j-n)}{\Gamma(2j+n+1)}} \tag{1.54}$$

Alors que la fonction d'onde pour ce cas de polynôme de Laguerre avec les conditions de deux équations $(1.47) et (1.48)$ d'une masse constante est donnée par :

$$\psi_L^2(x) = \sqrt{\frac{2\,n!\,(j-n)}{\Gamma(2j+n+1)}} \exp[(n-s)x] \exp\left[-\frac{1}{2}e^{-x}\right] \times L_n^{(2s-2n)}(e^{-x}) \tag{1.55}$$

Cas 3 : La constante de normalisation pour le troisième cas de polynôme de Laguerre généralisée est donnée directement par :

$$N_n^{\mathcal{L}3} = \sqrt{\frac{1}{2^{(2l-3)}\left(\frac{\Gamma(2l+n+3)}{n!} - \frac{\Gamma(2l+n+2)}{(n-1)!}\right)}} \tag{1.56}$$

Et la fonction d'onde dans ce cas de polynôme de Laguerre est donnée par:

$$\psi_L^3(x) = \sqrt{\frac{1}{2^{(2l-3)}\left(\frac{\Gamma(2l+n+3)}{n!} - \frac{\Gamma(2l+n+2)}{(n-1)!}\right)}} x^{l+1}\ e^{-x} \times L_n^{(2l+1)}(2x) \tag{1.57}$$

En prenant $\omega = \frac{a}{n+l+1} = 1$ voir la référence [2, 28].

b) Pour les polynômes orthogonaux en forme d'Hermite :

Les constantes de normalisation sont déterminées par l'utilisation la relation d'orthogonalité, donnée par l'équation (1.46) on obtient :

- **Cas 1 :** lorsque la masse constante $m(x) = 1 \ \rightarrow \mu(x) = x$:

$$N_H^1 = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}\,n!\ 2^n}} \tag{1.58}$$

Alors que la fonction d'onde de premier cas de polynôme d'Hermite est :

$$\psi_H^1(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}\, n!\ 2^n}}\, e^{-\frac{1}{2}x^2} H_n(x) \tag{1.59}$$

- **Cas 2 :** lorsque la masse est variable en forme d'exponentielle $m(x) = m_0\, exp(-\alpha|x|)$ implique que la fonction de masse auxiliaire $\mu(x)$ est de la forme

$$\mu(x) = \int \sqrt{m(x)}dx = \begin{cases} -\frac{2}{\alpha} e^{-\alpha x/2}, & (x > 0) \\ +\frac{2}{\alpha} e^{+\alpha x/2}, & (x < 0) \end{cases}, \tag{1.60}$$

à partir de la relation d'ortho normalisation on obtient la constante de normalisation dans le deuxième cas de polynôme d'Hermite suivante

$$N_H^2 = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\, n!\ 2^{(n-3)}\ (2n+1)^{5/2}}} \tag{1.61}$$

Et la fonction d'onde est écrite respectivement par :

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\, n!\ 2^{(n-3)}\ 2n + 1^{5/2}}}\ \ [\mu(x)]^{3/4} e^{\frac{-2\mu(x)}{2n+1}} H_n\left(\frac{-\mu(x)}{2n+1}\right) \tag{1.62}$$

Chapitre 2 :

La forme alternative de la mécanique quantique dans l'espace des phases

2.1 Introduction :

La fonction de distribution de Wigner est exprimée en termes des variables de position et d'impulsion. Elle est considérée comme une distribution de la mécanique quantique, dans l'espace des phases. Cette dernière joue le rôle d'une distribution de probabilité et satisfait à un certain nombre de propriétés.

En premier lieu, nous allons introduire le concept de l'opérateur densité, qui va nous permettre par la suite de définir la fonction de Wigner. On présente la reformulation de la mécanique quantique au moyen de la fonction de Wigner, puis on discutera de ces propriétés et on montrera que la fonction de distribution de Wigner, permet d'établir une correspondance entre la mécanique quantique et la mécanique classique. En suit, on présente en détail le passage entre les opérateurs quantiques et les fonctions de transformées de Weyl, qui sont fonction de x et p (et inversement) à l'aide d'une transformation de Weyl. Ainsi la transformation Wigner-Weyl, permet d'exprimer les valeurs moyennes des fonctions dans l'espace des phases, dans une forme très similaire à celles des valeurs moyennes, des opérateurs en mécaniques quantiques. En outre, le formalisme du produit de Moyal est basé étroitement sur la correspondance entre le produit des opérateurs quantiques, et le produit Moyal des fonctions dans l'espace des phases. Finalement, on prouve que les fonctions caractéristiques, sont un moyen pour obtenir la valeur moyenne qui correspond à l'opérateur quantique.

2.2 La fonction de distribution de Wigner :

La distribution de Wigner a été introduite par Eugene Wigner en 1932[1],est obtenue à travers de la transformation de Fourier de la grandeur de densité. Le but principal de cette distribution elle permettent de ramener les calculs de la mécanique quantique à de simples calculs de probabilités classiques, puis une fois les résultats obtenus, de revenir à l'interprétation quantique et ainsi de représenter la fonction d'onde qui apparaitre dans la solution de l'équation de Schrödinger dans l'espace de Hilbert a une distribution de quasi-probabilité dans l'espace de phase. Cette dernière fonction qui contient des informations complètes sur l'état quantique du système dans l'espace des phases est reconnue comme un outil important pour l'analyse de la connexion classique-quantique.

La mécanique quantique et classique se présentant de façon très différente dans leurs structures formelles.

En mécanique classique la description d'un système physique avec un nombre fini de degrés de liberté (p^N, x^N), impulsion et positions données de l'espace pour N particules ponctuelles. Dans le cas où les particules ont une structure, comme les molécules ou les noyaux, ce système est représenté par un point (p^N, x^N)dans l'espace des phases a $6N$ dimension, on s'intéresse au calcul

d'une quantité classique mesurable dans ce point est noté par $A_{cl}\,(p^N, x^N)$. Par contre en mécanique statistique classique la description d'un ensemble de systèmes de N particules est décrite à l'aide d'une fonction de densité de probabilité qui est toujours positive $\rho_{cl}(p^N, x^N) \geq 0$ dans l'espace des phases.

La valeur moyenne de la quantité $A_{cl}(p^N, x^N)$ est alors :

$$\int A_{cl}(p^N, x^N)\, \rho_{cl}(p^N, x^N)(p^N, x^N\, , x)\, dp^N dx^N \tag{2.1}$$

Mais dans la mécanique quantique, on représente le système par vecteur d'état (ket) $|\psi\rangle$ dans l'espace de Hilbert. A toute quantité observable correspond un opérateur, la valeur moyenne de cette opérateur est donnée par :

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int \psi^*(x) \hat{A}\, \psi\,(x)\, dx = tr\,(\hat{A}\hat{\rho}) \tag{2.2}$$

Où $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ est l'opérateur de densité

La description d'un système dans le cadre de la mécanique quantique statistique est décrite par un opérateur de densité statistique, et ça c'est le point de départ que nous avons besoin pour extraire la formule de Wigner.

Notons que l'opérateur de densité ayant les propriétés suivantes :

1. L'herméticité :

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^{\dagger} \tag{2.3}$$

Conservation de probabilité totale :

$$tr\,(\hat{\rho}) = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \tag{2.4}$$

2. Dans le cas d'un étatψ, l'opérateur densité est alors un projecteur

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}^{\dagger} = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{2.5}$$

L'opérateur densité $\hat{\rho}\,(x)$ de la variable de position x est donné par :

$$\hat{\rho}\,(x) = |\psi(x)\rangle\langle\psi(x)| = |\psi(x)|^2 \tag{2.6}$$

Alors, il se fait juste donc de connait la fonction d'onde $\psi(x)$, pour déterminer la densité de probabilité $\hat{\rho}\,(x)$ ainsi, la détermination de la densité de probabilité sur la représentation en impulsion p , est également donnée par la fonction $\phi(p)$.Cette dernière fonction peut être déterminé à partir de la transformation de fourrier sur la fonction d'onde $\psi(x)$. Il serait intéressant d'avoir une fonction dépendante de la variable de position x et d'impulsion p, dans l'espace des phases, qui s'appelle fonction de distribution de Wigner, et qui détermine la distribution de probabilité. En effet, lors de la localisation d'un système quantique dans l'espace des phases, cette fonction se

comporte comme une distribution de probabilité. Elle permet de retrouver facilement les résultats des calculs quantiques, surtout pour des problèmes complexes de la physique. L'objectif est de trouver une certaine correction quantique à la physique statistique classique.

Pour cela nous présentons l'opérateur de densité statistique d'un système dans le cadre de la mécanique quantique statistique dépendant de la position par :

$$\hat{\rho} \rightarrow (x'', x') \tag{2.7}$$

De telle sorte(x'', x')définit le saut quantique de la position x' à la position x''. Pour simplifier l'étude en prend le cas très simple (une seule particule se mouvant dans un espace à une dimension), et nous essayons de construire la fonction de distribution de Wigner. Alors l'opérateur de matrice de densité statistique est :

$$\hat{\rho}\,(x'', x') = \langle x''|\hat{\rho}\,|x'\rangle \tag{2.8}$$

Le saut de centre quantique donc s'écrit :

$$x = \frac{x'' + x'}{2} \tag{2.9}$$

En fait un changement de variable :

$$\begin{cases} x' = x - \dfrac{1}{2}y \\ x'' = x + \dfrac{1}{2}y \end{cases}$$

Alors, l'opérateur de densité devient

$$\hat{\rho}\,(x'', x') \rightarrow \hat{\rho}\,(x, y) \tag{2.10}$$

On introduire ce changement de variable dans l'équation (2.8), on obtient l'opérateur de densité exprimé en fonction de la position de la manière suivante :

$$\hat{\rho}\,(x'', x') = \left\langle x + \tfrac{1}{2}y \middle| \hat{\rho} \middle| x - \tfrac{1}{2}y \right\rangle \quad , \hat{\rho}\,(x', x'') = \left\langle x - \tfrac{1}{2}y \middle| \hat{\rho} \middle| x + \tfrac{1}{2}y \right\rangle \tag{2.11}$$

Maintenant on applique la transformation de fourrier[4] sur la grandeur de la densité précédente de l'équation (2.11), par conséquence on obtient la fonction de distribution de quasi-probabilité de Wigner unidimensionnelle dans le cas d'une seule particule non-relativiste de l'état noté $\psi(x)$ comme suit [28]

$$\begin{aligned} W(x,p) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp\left(-\frac{i\,p\,y}{\hbar}\right)\hat{\rho}\,(x'', x') \\ W(x,p) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle x + \tfrac{1}{2}y \middle| \hat{\rho} \middle| x - \tfrac{1}{2}y \right\rangle \exp\left(-\frac{i\,p\,y}{\hbar}\right) \end{aligned} \tag{2.12}$$

Et aussi

$$W(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp\left(+\frac{ipy}{\hbar}\right)\hat{\rho}\,(x',x'')$$

$$W(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle x-\tfrac{1}{2}y\middle|\hat{\rho}\middle|x+\tfrac{1}{2}y\right\rangle \exp\left(+\frac{ipy}{\hbar}\right) \quad (2.13)$$

Cette expression permet de transformer un système d'état quantique de la matrice de densité$\hat{\rho}\ (x) = |\psi\rangle\langle\psi|$ à l'état quasi-classique de la fonction de distribution de Wigner $W(x,p)$, dans l'espace des phases.

D'après l'équation (2.8), la densité de probabilité de la position de l'état $\psi(x)$ s'écrit comme :

$$\hat{\rho}\,(x'',x') = \left\langle x+\tfrac{1}{2}y\middle|\hat{\rho}\middle|x-\tfrac{1}{2}y\right\rangle = \psi^*\left(x-\frac{1}{2}y\right)\,\psi\,\left(x+\frac{1}{2}y\right) \quad (2.14)$$

Et comme $\hat{\rho}\ = \hat{\rho}^{\ \dagger}$ on a donc

$$\hat{\rho}\,(x',x'') = \left\langle x-\tfrac{1}{2}y\middle|\hat{\rho}\middle|x+\tfrac{1}{2}y\right\rangle = \psi^*\left(x+\frac{1}{2}y\right)\,\psi\,\left(x-\frac{1}{2}y\right) \quad (2.15)$$

On remplace les deux équations (2.14) et (2.15) dans (2.12) et (2.13) respectivement on obtient la fonction de Wigner comme suit :

$$W(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\,\psi^*\left(x-\frac{1}{2}y\right)\,\psi\,\left(x+\frac{1}{2}y\right)\exp\left(-\frac{i\,p\,y}{\hbar}\right) \quad (2.16)$$

Ou

$$W(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\,\psi^*\left(x+\frac{1}{2}y\right)\,\psi\,\left(x-\frac{1}{2}y\right)\exp\left(+\frac{i\,p\,y}{\hbar}\right) \quad (2.17)$$

Avec la fonction d'onde sur la position est noté par$\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$. $W(x,p)$ C'est la fonction de distribution de probabilité de Wigner d'un système unidimensionnelle avec une seule particule. D'une autre écriture c'est une description d'un état quantique ψ dans l'espace des phases.

Notons que la relation $\langle x''|\hat{\rho}\,|x'\rangle^* = \left\langle x''\middle|\hat{\rho}^{\dagger}\middle|x'\right\rangle$ est réalisée c'est-à-dire le caractère réel de densité est visible, et comme$\hat{\rho}\ = \hat{\rho}^{\dagger}$ est hermétique, on peut dire que la fonction de distribution de Wigner est réel. Donc on le droit d'écrit :

$$W(x,p) = W(x,p)^* \quad (2.18)$$

De la même façon en introduire la fonction de Wigner avec une forme de représentation d'impulsion comme suit :

$$W(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} du\,\phi^*\left(p-\frac{1}{2}u\right)\,\phi\,\left(p+\frac{1}{2}u\right)\exp\left(+\frac{i\,x\,u}{\hbar}\right) \quad (2.19)$$

Et

$$W(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} du\, \phi^*\left(p+\frac{1}{2}u\right)\, \phi\, \left(p-\frac{1}{2}u\right)\exp\left(-\frac{i\,x\,u}{\hbar}\right) \tag{2.20}$$

Pour plus de détail voir [28]

2.2.1 Les propriétés de la fonction de distribution de Wigner :

- **L'Herméticité :** comme nous avons vue dans l'équation (2.18) la fonction de distribution de Wigner devrait hermitienne à cause de l'herméticité de l'opérateur de densité$\hat{\rho}$, par conséquence la fonction de Wigner $W(x,p)$est réelle.
- **Distribution marginale :** on intègre la fonction de Wigner données par l'équation (2.12) par rapport à l'impulsion p comme suit :

$$W(x) = \int dq\, W(q\,,p\,) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int\, dp\, \int dy \left\langle x+\tfrac{1}{2}y\middle|\hat{\rho}\middle|x-\tfrac{1}{2}y\right\rangle \exp\left(-\frac{i\,p\,y}{\hbar}\right)$$

$$= \int dy\, \delta(y) \left\langle x+\tfrac{1}{2}y\middle|\hat{\rho}\middle|x-\tfrac{1}{2}y\right\rangle = \langle x|\hat{\rho}\,|x\rangle \tag{2.21}$$

$$= \psi^*(x)\,\psi\,(x) = \,|\,\psi\,(x)|^2$$

L'équation (2.21) donne la densité de probabilité de la position x quand le système soumis à une mesure dite « distribution marginale »

Avec $\int \exp\left(-\frac{i\,p\,y}{\hbar}\right)\, dp = \, 2\pi\hbar\, \delta(x)$

- L'intégrale de la fonction de Wigner sur la position x donne :

$$W(p) = \int dx\, W(x\,,p) = \langle p|\hat{\rho}\,|p\rangle = \psi^*(p)\,\psi\,(p) = \,|\,\psi\,(p)|^2 \,\geq 0 \tag{2.22}$$

Pour plus détails voir [28]

- La fonction de distribution est normalisée :

$$\int dx \int dpW(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx \int dp \int dy \exp\left(-\frac{ipy}{\hbar}\right)\left\langle x+\tfrac{1}{2}y\middle|\hat{\rho}\middle|x-\tfrac{1}{2}y\right\rangle$$

$$= \int dx\, dy\, \delta(y)\left\langle x+\tfrac{1}{2}y\middle|\hat{\rho}\middle|x-\tfrac{1}{2}y\right\rangle = \int dx\, \langle x|\hat{\rho}\,|x\rangle$$

Nous aboutissons à l'expression

$$\int dx \int dpW(x,p) = \int \psi^*(x)\psi\,(x) = \langle\psi(x)||\psi(x)\rangle = tr(\hat{\rho}\,) = 1 \tag{2.24}$$

La fonction de Wigner $W(x,p)$ elle joue donc le rôle d'une fonction de distribution, on ne peut pas la considère comme une densité de probabilité dans l'espace de phase parce qu'elle n'est pas nécessairement définie positive.

- La fonction de Wigner est bornée sur toute l'espace des phases :

$$\left|W_{\psi}(x\,,p)\right|^{2} \leq \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{2}$$

De cette équation on peut déduire que

$$\left|W_{\psi}(x\,,p)\right|^{2} \leq \frac{1}{\pi\hbar} \rightarrow -\frac{1}{\pi\hbar} \leq W_{\psi}(x\,,p) \leq +\frac{1}{\pi\hbar} \tag{2.25}$$

D'après l'équation (2.25) on peut dire que la fonction de Wigner est réelle et normée, mais elle n'est pas toujours définit de manière positive, comme la fonction de distribution de la théorie classique. Elle ne peut donc pas être interprétée comme une densité de probabilité. Si pour ça est appelle « une distribution quasi-probabilité ».

2.3. Transformation de Weyl dans l'espace des phases :

Pas longtemps après l'invention de la mécanique quantique Herman Weyl a introduit en 1928 une nouvelle quantification qui permet d'associer un opérateur agissant dans l'espace de Hilbert à une fonction $f(x,p)$décrite avec des variables de position x et d'impulsion p qui est appelée la transformation de Weyl définie sur l'espace des phases. Ce qui a été indiqué et souligné par Moyal en 1949 .

La transformation de Weyl est la théorie mathématique qui a pour but d'essayer de passer entre le monde quantique et le monde classique. La correspondance de Weyl permet de transformer un opérateur$\hat{A}$dans l'espace de Hilbert à une fonction scalaire (nombre) par rapport à p et q dans l'espace des phases.

On connait bien que pour chaque quantité observable correspondant un opérateur$\hat{A}$en mécanique quantique dans un étatψ . La valeur moyenne de cet opérateur est donnée dans l'équation (2.2).

De plus on peut faire correspondre à chaque opérateur une fonction $\tilde{A}\,(q,p)$ de manière on a toujours de travailler dans le cas d'une seule particule. La fonction $\tilde{A}\,(q,p)$ indiquée par l'expression tilde dite la transformation de Weyl.

La transformation de Weyl est une représentation de la fonction de quasi-probabilité de Wigner donné par l'équation (2.13), on peut faire correspondre à chaque opérateur a une fonction $\tilde{A}(q,p)$ de la façon suivante :

$$\tilde{A}(q,p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy\ \left\langle x - \tfrac{1}{2}y \middle| \hat{A} \middle| x + \tfrac{1}{2}y \right\rangle \exp\left(+\frac{i\,p\,y}{\hbar}\right) \tag{2.26}$$

Nous changeant le terme $\frac{1}{2\pi\hbar}\hat{\rho}$ par $\hat{A}$ et $W\ (x,p)$par$\tilde{A}(q,p)$.

La démonstration de l'équation (2.26) :

On utilisant les relations de fermeture sur les vecteurs$p', p'', q' et\ q''$nous pouvons écrire :

$$\hat{A} = \int\int\int\int dp'dp''dx'\ dx''|p'\rangle\langle p'|\ |x'\rangle\langle x'|\hat{A}\ |x''\rangle\langle x''||p''\rangle\langle p''| \tag{2.27}$$

Avec les transformations suivantes :

$$\begin{cases} x' = x - \dfrac{1}{2}y \quad , \quad p' = p - \dfrac{1}{2}u \\ x'' = x + \dfrac{1}{2}y \quad , \quad p'' = p + \dfrac{1}{2}\ u \end{cases} \tag{2.28}$$

Dont le Jacobien est :

$$\mathcal{J} = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial x'}{\partial x} & \dfrac{\partial x'}{\partial y} & \dfrac{\partial x'}{\partial p} & \dfrac{\partial x'}{\partial u} \\ \dfrac{\partial x''}{\partial x} & \dfrac{\partial x''}{\partial y} & \dfrac{\partial x''}{\partial p} & \dfrac{\partial x''}{\partial u} \\ \dfrac{\partial p'}{\partial x} & \dfrac{\partial p'}{\partial y} & \dfrac{\partial p'}{\partial p} & \dfrac{\partial p'}{\partial u} \\ \dfrac{\partial\ p''}{\partial x} & \dfrac{\partial\ p''}{\partial y} & \dfrac{\partial\ p''}{\partial p} & \dfrac{\partial\ p''}{\partial u} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \end{vmatrix}^3 = 1 \tag{2.29}$$

Donc $\hat{A}$devient :

$$\hat{A} = \int\iiint dp\ dx\ du\ dy\ \left|p - \frac{1}{2}\ u\right\rangle\left\langle p - \frac{1}{2}u\right|x - \frac{1}{2}\ y\rangle\ \times$$
$$\left\langle x - \tfrac{1}{2}\ y\right|\hat{A}\left|x + \tfrac{1}{2}\ y\right\rangle\left\langle x + \tfrac{1}{2}\ y\right|p + \tfrac{1}{2}u\rangle\left\langle p + \frac{1}{2}u\right| \tag{2.30}$$

On fait le changement suivant :

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}x\,p} \tag{2.31}$$

On obtient :

$$\hat{A} = \int\iiint dp\ dx\ du\ dy\left\langle x - \tfrac{1}{2}\ y\right|\hat{A}\left|x + \tfrac{1}{2}\ y\right\rangle\frac{1}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(\,xu + py)}\left|p - \frac{1}{2}\ u\right\rangle\left\langle p + \frac{1}{2}\ u\right| \tag{2.32}$$

Alors le résultat finale :

$$\hat{A} = \frac{1}{2\pi\hbar}\iint dx\ dp\ \tilde{A}(x,p)\hat{\Delta}(x\ \ p) \tag{2.33}$$

Les expressions de $\tilde{A}(x,p)\ et\ \hat{\Delta}(x,\ p)$ sont respectivement :

$$\tilde{A}(x,p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle x - \tfrac{1}{2}y \middle| \hat{A} \middle| x + \tfrac{1}{2}y \right\rangle \exp\left(+\frac{ipy}{\hbar}\right) \tag{2.34}$$

$$\hat{\Delta}(x,p) = \int_{-\infty}^{+\infty} du exp\left(+\frac{ixu}{\hbar}\right) \left| p - \frac{1}{2}u \right\rangle \left\langle p + \frac{1}{2}u \right| \tag{2.35}$$

$\tilde{A}(x,p)$ est une fonction scalaire qui dépend de l'opérateur$\hat{A}$.on peut aussi exprimer$\tilde{A}(x,p)$of fonction d'éléments de matrice, de l'opérateur dans la représentation impulsion p comme suit [30] :

$$\tilde{A}(x,p) \int_{-\infty}^{+\infty} du \left\langle p + \tfrac{u}{2} \middle| \hat{A} \middle| p - \tfrac{u}{2} \right\rangle \exp\left(+\frac{i\ x\ u}{\hbar}\right) \tag{2.36}$$

Voir la démonstration de l'équation (2.36) dans [28]

$\hat{\Delta}(x,\ p)$ est un opérateur Universal indépendant de$\tilde{A}$ ayant les propriétés suivantes :

- L'herméticité :

L'opérateur $\hat{\Delta}(x,\ p)$est hermitien, en effet :

$$\hat{\Delta}^{\dagger}(x,p) = \int_{-\infty}^{+\infty} du\ exp\left(-\frac{i\ x\ u}{\hbar}\right) \left| p - \frac{1}{2}\ u \right\rangle \left\langle p + \frac{1}{2}\ u \right| \tag{2.37}$$

La transformation de l'opérateur de quantification : puisque $\hat{\Delta}\ \ (x,p)$ est un opérateur, alors il existe une fonction $\widetilde{\Delta}\,(x,p)$dans l'espace des phases qui correspond à cet opérateur voir [28]

2.3.1 L'expression de la valeur moyenne :

On peut déterminer la trace de produit de deux opérateurs $\hat{A}\hat{B}$, à partir des traces des opérateurs de quantifications comme suit, on utilise l'équation (2.33), deux fois (ça veut dire le produit de deux opérateurs) nous obtenons :

$$\hat{A}\hat{B} = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2 \int \iiint dx\ dp\ dx'dp'\tilde{A}(x,p)\tilde{B}(x',p')\hat{\Delta}\,(x,p)\hat{\Delta}\,(x',p') \tag{2.38}$$

Selon les propriétés des traces des opérateurs des quantifications [28] on obtient :

$$tr(\hat{A}) = \frac{1}{2\pi\hbar}\iint dx\ dp\ \tilde{A}(x,p)\ tr(\hat{A}(x,p)) = \frac{1}{2\pi\hbar}\iint dx\ qp\ \tilde{A}(x,p) \tag{2.39}$$

De la même manière, on obtient :

$$tr\left(\hat{A}\hat{B}\right) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2 \int \iiint dq\ dp\ dx'dp'\tilde{A}(x,p)\tilde{B}(x',p')\ tr(\hat{\Delta}\,(x,p))\ tr(\hat{\Delta}\,(x',p'))$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2 \int\int\int\int dx\, dp\, dx' dp' \tilde{A}(x,p)\tilde{B}(x',p')\, 2\pi\hbar\, \delta(p-p') \times \delta(x-x') \tag{2.40}$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2 \int\int\int\int dx\, dp\, dx' dp' \tilde{A}(x,p)\tilde{B}(x'p') \equiv tr\left(\hat{B}\hat{A}\right)$$

On déduit la transformation de Weyl de l'opérateur Hamiltonien $\hat{H}(\hat{x},\hat{p}) = \hat{T}(\hat{p}) + \hat{U}(\hat{x})$ du système unidimensionnel, par la forme : $\tilde{H}(x,p) = \tilde{T}(p) + \tilde{U}(x)$.

Les valeurs moyennes des opérateurs $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{T}$, $\hat{U}$ et $\hat{H}$, sont respectivement données par

$$\langle\hat{q}\rangle = \int\int W(x,p)\tilde{x}dx\, dp = \int\int W(x,p)xdx\, dp,$$

$$\langle\hat{p}\rangle = \int\int W(x,p)\tilde{p}dx\, dp = \int\int W(x,p)pdx\, dp,$$

$$\langle\hat{T}\rangle = \int\int W(x,p)\tilde{T}(p)dx\, dp = \int\int W(x,p)T(p)dx\, dp,$$

$$\langle\hat{U}\rangle = \int\int W(x,p)\tilde{U}(x)dx\, dp = \int\int W(x,p)U(x)dx\, dp,$$

$$\langle\hat{H}\rangle = \int\int W(x,p)\tilde{H}(x,p)dx\, dp = \int\int W(x,p)\{T(p)+U(x)\}dx\, dp, \tag{2.41}$$

Où T et U représentent respectivement l'énergie cinétique et l'énergie potentielle du système.

La transformée de Weyl sera indiquée par un tilde, qui convertit l'opérateur en une fonction dépendante de q et p, dans l'espace des phases.

Les transformée de Weyl sont particulièrement simples si l'opérateur est une fonction de $\hat{x}$ où de $\hat{p}$ seulement. Alors la transformée de Weyl est la même fonction de x ou de p respectivement

$$F(\hat{x}) \leftrightarrow f(x)\,, \qquad F(\hat{p}) \leftrightarrow f(p) \tag{2.42}$$

On a donc aussi

$$\hat{x} \leftrightarrow x\,, \qquad \hat{p} \leftrightarrow p \tag{2.43}$$

Un autre exemple utile est

$$\frac{1}{2}\{\hat{p}, F(\hat{x})\} \leftrightarrow pf(x) \tag{2.44}$$

Où les accolades indiquent l'anti-commutateur.

$$\left\{\hat{A},\hat{B}\right\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \tag{2.45}$$

L'exemple précédent est un cas particulier de la correspondance de Weyl suivante. On rencontre très souvent des opérateurs dont les transformées de Weyl ont la forme d'un produit d'une

fonction f de x ou de p multipliée par une puissance p^n (ou x^n) de p (ou x) avec n entier. On a alors la correspondance de Weyl suivante :

$$\tilde{A}(x,p) = f(x)p^n \leftrightarrow \hat{A} = \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}\hat{p}^{\,r}\hat{f}(\hat{x})\;\;\hat{p}^{(n-r)} \tag{2.46}$$

Le nombre de combinaisons de r parmi n est noté par $\binom{n}{k} \equiv \frac{n!}{(n-k)!\,k!}$ où $C_{n,k}$ qui appelé coefficient binomial.

Ici $\tilde{A}(x,p)$ est beaucoup plus simple que $\hat{A}$. Il y aura donc souvent avantage à calculer avec la transformée de Weyl $\tilde{A}(x,p)$ considérons quelques cas particuliers de l'équation (2.46)

$$\begin{cases} \tilde{A} = x \leftrightarrow \hat{A} = \hat{x} \\ \tilde{A} = p \leftrightarrow \hat{A} = \hat{p} \\ \tilde{A} = px \leftrightarrow \hat{A} = \frac{1}{2}(\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p}) \\ \tilde{A} = xp \leftrightarrow \hat{A} = \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) \\ \tilde{A} = p^2x \leftrightarrow \hat{A} = \frac{1}{4}(\hat{x}\hat{p}^2 + 2\hat{p}\hat{x}\hat{p} + \hat{p}^2\hat{x}) \\ \tilde{A} = p^2x^2 \leftrightarrow \hat{A} = \frac{1}{4}(\hat{x}^2\hat{p}^2 + 2\hat{p}\hat{x}^2\hat{p} + \hat{p}^2\hat{x}^2). \end{cases} \tag{2.47}$$

Il est clair, déjà ici, que

$$\frac{1}{2}(\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p})\frac{1}{2}(\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p}) \neq \frac{1}{4}(\hat{x}^2\hat{p}^2 + 2\hat{p}\hat{x}^2\hat{p} + \hat{p}^2\hat{x}^2) \tag{2.48}$$

En effet, en mettant les $\hat{x}$ devant les $\hat{p}$ à l'aide de la règle de commutation de Dirac (en prenant$\hbar = 1$), on trouve pour le membre de gauche :

$$\left(\hat{x}^2\hat{p}^2 + \frac{2\hat{x}\hat{p}}{i} - \frac{1}{4}\right) \tag{2.49}$$

Et pour celui de droite :

$$\left(\hat{x}^2\hat{p}^2 + \frac{2\hat{x}\hat{p}}{i} - \frac{1}{2}\right) \tag{2.50}$$

Donc, en générale, quand$\tilde{A} \leftrightarrow \hat{A}$, on n'est a pas $\tilde{A}^2 \leftrightarrow \hat{A}^2$

En remarque grâce à la relation de commutation de Dirac, on peut exprimer l'opérateur $\hat{A}$ correspondant à $\tilde{A} = p^2x$ comme

$$\hat{A} = \hat{p}\hat{x}\hat{p} = \hat{x}\hat{p}^2 - \hat{p}\hat{x}\hat{p} + \hat{p}^2\hat{x} = \frac{1}{2}(\hat{p}^2\hat{x} + \hat{x}\hat{p}^2) \tag{2.51}$$

La forme alternative de l'équation (2.46) avec n anti-commutateurs voir l'équation (2.45) on a

$$\tilde{A}(x,p) = g(x)\, p^n \leftrightarrow \hat{A} = \frac{1}{2^n}\{\cdots\{g(\hat{x}),\hat{p}\},\cdots,\hat{p}\} \tag{2.52}$$

Par exemple

$$\tilde{A}(x,p) = g(x)p \leftrightarrow \hat{A} = \frac{1}{2}\{g(\hat{x}),\hat{p}\} = \frac{1}{2}\big(g(\hat{x})\hat{p} + \hat{p}g(\hat{x})\big) \tag{2.53}$$

De même on obtient

$$\tilde{A}(x,p) = g(x)\, p^2 \leftrightarrow \hat{A} = \tfrac{1}{4}\big\{\{g(\hat{x}),\hat{p}\},\hat{p}\big\} = \tfrac{1}{4}\big(g(\hat{x})\hat{p}^2 + 2\hat{p}g(\hat{x})\hat{p} + \hat{p}^2 g(\hat{x})\big). \tag{2.54}$$

Et ainsi de suite : on forme les coefficients du binôme de Newton, c'est-à-dire que l'équation (2.52) donne l'équation (2.46).

2.4. Produit de Moyal :

Dans l'espace des phases on définit le produit de Moyal de deux fonctions $\tilde{A}(q\ p) \star \tilde{B}(q\ p)$ par le produit de transformation de Weyl de deux opérateurs$\hat{A}\hat{B}$exprimé de leur transformation de Weyl.

Ou le symbole $\star$ indique le produit étoile de Moyal. Le produit de Moyal de deux opérateurs est donne par :

$$\hat{A}\hat{B} \leftrightarrow \tilde{A}(qp) \star \tilde{B}(qp) = \tilde{A}(qp) exp\left(-\frac{i\hbar}{2}\Lambda\right)\tilde{B}(qp) \tag{2.55}$$

D'où :

$$\star = exp\left(-\frac{i\hbar}{2}\Lambda\right) \tag{2.56}$$

Et Λ est un opérateur différentiel, son expression dans le cas unidimensionnel par :

$$\Lambda = \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p}\cdot\frac{\vec{\partial}}{\partial q} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\cdot\frac{\vec{\partial}}{\partial p} \tag{2.57}$$

Les flèches indiquent dans quelle direction on dérive.

Remarque: voir la démonstration de l'équation (30) dans [28]

Comme nous avons dit, le produit de Moyal de deux fonctions dans l'espace des phases n'est pas commutatif d'où :

$$\tilde{F} \star \tilde{g} \neq \tilde{g} \star \tilde{F} \tag{2.58}$$

Mais il est associatif :

$$\left(\tilde{F} \star \tilde{F}\right) \star \tilde{F} = \tilde{F} \star \left(\tilde{F} \star \tilde{F}\right) \tag{2.59}$$

On peut calculer par exemple le produit de Moyal de $\hat{x}\hat{p}$:

$$\hat{x}\hat{p} \leftrightarrow x \star p = x\left[1 - \frac{i\hbar}{2}\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial x} \cdot \frac{\vec{\partial}}{\partial p} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p} \cdot \frac{\vec{\partial}}{\partial x}\right)\right] p = xp + \frac{i\hbar}{2} \tag{2.60}$$

Sachant que :

Le développement en série de l'exponentielle est donné par :

$$\exp(m) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m^n}{n!} \tag{2.61}$$

Et de même

$$\hat{p}\hat{x} \leftrightarrow p \star x = p\left[1 - \frac{i\,\hbar}{2}\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial x} \cdot \frac{\vec{\partial}}{\partial p} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p} \cdot \frac{\vec{\partial}}{\partial x}\right)\right] x = p\,x - \frac{i\,\hbar}{2} \tag{2.62}$$

On peut aussi déterminer le commutateur de produit de Moyal de deux opérateurs comme suit :

$$[x, p]_\star = x \star p - p \star x = i\,\hbar \tag{2.63}$$

En peut généraliser la correspondance de Weyl inverse de l'équation (2.60) par la relation suivante

$$\hat{x}^m\hat{p}^l \leftrightarrow \sum_{k=0}^{min(m,l)} k!\left(\frac{i}{2}\right)^k \binom{m}{k}\binom{l}{k} x^{m-k}p^{l-k} \tag{2.64}$$

2.5. Fonction caractéristique via la transformation de Fourier

Nous allons maintenant présenter la correspondance entre la fonction de transformée de Weyl $x^m p^l$, dans l'espace des phases et la fonction caractéristique $C(\sigma, \tau)$ à deux variables σ et τ qui à été trouver, via la transformée de Fourier.

En particulier, la valeur moyenne du résultat de la mesure de l'opérateur quantique $\hat{x}^m\hat{p}^l$ qui est effectuée sur un système d'état ψ, est donnée comme suit

$$\langle \hat{x}^m\hat{p}^l \rangle = \langle \psi | \hat{x}^m\hat{p}^l | \psi \rangle = \sum_{k=0}^{min(m,l)} k!\left(\frac{i}{2}\right)^k \binom{m}{k}\binom{l}{k} \int\int dpdq\, W(q,p) x^{m-k}p^{l-k}, \tag{2.65}$$

Cela en supposant que l'opérateur $\hat{x}^m\hat{p}^l$ correspond à un système représentant la fonction de distribution $W(q, p)$, dans l'espace des phases et aussi la densité $\hat{\rho}$ dans l'espace de Hilbert.

L'expression de la fonction caractéristique $C(\sigma,\tau)$ à deux variables σ et τ est obtenue par la transformation de Fourier de la fonction de Wigner $W(q,p)$ par la formule suivante

$$C(\sigma,\tau) = \langle e^{i(\sigma\, x + \tau p)} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, exp[i(\sigma\, x + \tau p)]\, W(q,p). \tag{2.66}$$

Où$\alpha(\sigma,\tau)$ est une fonction caractéristique par les deux variables σ et τ, dite transformation de Fourier de $W(q,p)$,

Les valeurs moyennes du produit des moments $\hat{x}^m \hat{p}^l$ peuvent être obtenues en utilisant la relation des dérivées mixtes de la fonction caractéristique comme suit [4] :

$$\int\int dpdq\; W(q,p) x^m p^l = \left(\frac{1}{i}\right)^{m+l} \frac{\partial^l}{\partial \tau^l} \frac{\partial^m C(\sigma,\tau)}{\partial \sigma^m}\bigg|_{\tau=\sigma=0} \tag{2.67}$$

D'après les deux équations (D) et (E) on obtient

$$\langle \hat{x}^m \hat{p}^l \rangle = \sum_{k=0}^{min(m,l)} k! \left(\frac{i}{2}\right)^k \binom{m}{k} \binom{l}{k} \left(\frac{1}{i}\right)^{m+l-2k} \frac{\partial^{l-k}}{\partial \tau^{l-k}} \frac{\partial^{m-k} C(\sigma,\tau)}{\partial \sigma^{m-k}}\bigg|_{\tau=\sigma=0} \tag{2.68}$$

Pour approfondir la compréhension nous présentons les deux cas suivants

Cas 1 : Polynôme d'Hermite: La fonction de Wigner de l'état de Fock n de l'oscillateur Harmonique pour le cas 1 d'Hermite avec une masse constante dans l'espace de phases est de la forme suivante :

$$W_H(x\,,p) = \frac{(-1)^n}{\pi} e^{-(x^2+p^2)} L_n\big(2(x^2+p^2)\big) \tag{2.69}$$

Où L_n est le polynôme de Laguerre d'ordre n.

La fonction de Wigner de l'équation (2.69) est de forme gaussienne uniquement pour l'état fondamentale $n = 0$, avec l'expression de la fonction caractéristique $C(\sigma,\tau)$ à deux variables σ et τ est obtenue par la transformation de Fourier de la fonction de Wigner $W_H(x\,,p)$ par la formule suivante

$$C(\sigma,\tau) = e^{-\frac{(\sigma^2+\tau^2)}{4}} L_n\left(\frac{\sigma^2+\tau^2}{2}\right) \tag{2.70}$$

Cas 2 : Polynôme de Laguerre :

L'expression analytique de la fonction de distribution de Wigner (FDW) pour le potentiel de Morse est donnée par :

$$W\left(\psi_{n,N}^{(\mathcal{M})}|x\,,p\right)=\frac{2}{\pi}\sum_{l_1=0}^{n}\sum_{l_2=0}^{n}\quad\gamma_{l_1,l_2}^{n,N}\left(\mu(x)\right)^{2(N-n)+l_1+l_2}K_{l_1-l_2+2ip}\left(\mu(x)\right), \tag{2.71}$$

Selon la transformation de Fourier de la fonction de Wigner $W_L(x\,,p)$ on obtient la fonction caractéristique suivante [28]

$$C(\sigma,\tau)=\sum_{l_1=0}^{n}\sum_{l_2=0}^{n}\quad\gamma_{l_1,l_2}^{n,N}\;2^{\beta'}\frac{e^{-\alpha'\tau}}{(1+e^{-\tau})^{\beta'}}\Gamma(\beta'-i\sigma)\;e^{i\,\lambda\,\sigma} \tag{2.72}$$

Où

$$\begin{aligned}\beta'&=2(N-n)+l_1+l_2\\ \alpha'&=(N-n)+l_1\\ \lambda&=ln\left(\frac{(2N+1)(1+e^{-\tau})}{2\,e^{-\frac{\tau}{2}}}\right)\end{aligned} \tag{2.73}$$

Chapitre 3 :

Fonction de distribution de Wigner pour les polynômes d'Hermite et de Laguerre généralisées

3.1 Introduction :

Depuis 1920 de nombreux physiciens ont abordé le problème relatif à la relation entre la mécanique quantique et la mécanique classique, ils ont donné un formalisme qui transforme les états quantiques à des états quasi-classiques. Pour rétablir la connexion entre la mécanique quantique et la mécanique classique. Les fonctions de distribution de Wigner donnent un traitement alternatif pour décrire la mécanique quantique dans l'espace des phases. Ces derniers sont liés à des solutions exactes de l'équation de Schrödinger adaptée pour un certains potentiels physique. Comme le potentiel de Morse nommé d'après le physicien Philip Morse, qui a été utilisée largement pour résoudre des nombreux problèmes physiques comme le modèle de traitement des systèmes moléculaire diatomique détermination des états ro-vibrationnels relatif au potentiel de Rosen-Morse et calcul de ses grandeurs thermodynamiques, le potentiel de l'oscillateur Harmonique est un autre exemple utilisé aussi pour résoudre des problème au physique comme l'Etude microscopique de systèmes fermioniques finis : corrélations dans les noyaux atomiques et gaz d'électrons confinés par un potentiel harmonique en présence d'un champ magnétique.

Dans ce chapitre on va déterminer analytiquement et numériquement la fonction de distribution de Wigner pour les polynômes d'Hermite et de Laguerre généralisée. On obtient dans le cas d'Hermite et de Laguerre généralisée, les valeurs moyennes de opérateurs de position et d'impulsion à l'aide de la fonction caractéristique et ce afin de vérifier la relation d'incertitude de Heisenberg. Cette dernière est particulièrement vérifiée aussi, dans deux cas intéressants: l'oscillateur harmonique et le potentiel de Morse.

3.2. La fonction de distribution de Wigner:

On revient au chapitre (1) ou nous avons déterminé les fonctions d'ondes de tous les cas de polynômes d'Hermite et de Laguerre généralisée, et nous essayons de déterminer dans ce chapitre leurs fonctions de distribution de Wigner au moyen de ces fonctions d'ondes propres qui a été réalisé sur un espace des phases non relativiste. On commence par le deuxième cas associé au potentiel de Morse

3.2.1: la fonction de distribution de Wigner pour le polynôme de Laguerre généralisée:

Nous rappelons que la fonction d'onde du deuxième cas de polynôme de Laguerre est donnée par:

$$\psi_L^2(x) = \sqrt{\frac{2\,n!\,(j-n)}{\Gamma(2j-n+1)}}((2j+1)e^{-x})^{j-n}\exp\left[-\frac{1}{2}(2j+1)e^{-x}\right] \times L_n^{(2s-2n)}((2j+1)e^{-x})$$

Dans ce cas :$\mu \equiv \mu(x) = (2j+1)e^{-x}$l'équation précédente devient :

$$\psi(x) = N_{L2}e^{\mu/2}\mu^{j-n}\,L_n^{2j-2n}(\mu(x)) \tag{3.1}$$

On remplace l'équation (3.1) dans l'expression générale de la fonction de distribution de Wigner donnée par l'équation (2.17)on obtient :

$$W(\psi_n^{L2}|x,p) = \frac{(N_n^{\mathcal{L}2})^2}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}(2j+1)e^{-(x-\frac{y}{2})}} \times \left[(2j+1)e^{-(x-\frac{y}{2})}\right]^{j-n} \times L_n^{2j-2n}\left[(2j+1)e^{-(x-\frac{y}{2})}\right] \times e^{-\frac{1}{2}(2j+1)e^{-(x+\frac{y}{2})}} \times \left[(2j+1)e^{-(x+\frac{y}{2})}\right]^{j-n} \times L_n^{2j-2n}\left[(2j+1)e^{-(x+\frac{y}{2})}\right] \times e^{-i\,p\,y}\,dy \tag{3.2}$$

En effectuant le changement de variable $u = e^{-\frac{y}{2}}$ L'équation (3.2) devient :

$$W(\psi_n^{L2}|x,p) = \frac{(N_n^{\mathcal{L}2})^2}{2\pi}\int_{0}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}(2j+1)e^{-x}\,u} \times e^{-\frac{1}{2}(2j+1)e^{-x}\frac{1}{u}} \times [(2j+1)e^{-x}\,u]^{j-n} \times \left[(2j+1)e^{-x}\frac{1}{u}\right]^{j-n} \times L_n^{2j-2n}\left[(2j+1)e^{-x}\frac{1}{u}\right] \times L_n^{2j-2n}[(2j+1)e^{-x}\,u] \times e^{-i\,p\,y}\,\frac{2\,du}{u} \tag{3.3}$$

Par la simplification on obtient :

$$W(\psi_n^{L2}|x,p) = \frac{(N_n^{\mathcal{L}2})^2}{\pi}\int_{0}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\mu\,(u+\frac{1}{u})} \times [\mu(x)]^{2j-2n} \times L_n^{2j-2n}[\mu\,u] \times L_n^{2j-2n}\left[\frac{\mu}{u}\right] \times u^{-2\,i\,p-1}du \tag{3.6}$$

Par l'utilisation le développement de Laguerre généralisés sous forme de série c'est-à-dire:

$$L_n^{2j-2n}(x) = \sum_{m=0}^{n}(-1)^m\binom{n+a}{n-m}\frac{x^m}{m!} \tag{3.7}$$

Alors :

$$L_n^{2j-2n}(\mu\,u) = \sum_{l_1=0}^{n}(-1)^{l_1}\binom{n+2(j-n)}{n-l_1}\frac{(\mu\,u)^{l_1}}{l_1!} \tag{3.8}$$

Et :

$$L_n^{2j-2n}\left(\frac{\mu}{u}\right) = \sum_{l_2=0}^{n}(-1)^{l_2}\binom{n+2(j-n)}{n-l_2}\frac{\left(\frac{\mu}{u}\right)^{l_1}}{l_2!} \tag{3.9}$$

On remplace dans l'équation (3.6) on obtient:

$$W(\psi_n^{L2}|x,p) = \frac{(N_n^{\mathcal{L}2})^2}{\pi} \times [\mu(x)]^{2j-2n}\int_{0}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\mu\,(u+\frac{1}{u})} \times \sum_{l_1=0}^{n}\sum_{l_2=0}^{n}\frac{(-1)^{l_1+l_2}}{l_1!\,l_2!} \times \binom{n+2(j-n)}{n-l_1}\binom{n+2(j-n)}{n-l_2} \times u^{l_1-l_2-2\,i\,p-1} \times \mu^{l_1+l_2}\,du \tag{3.10}$$

L'équation (3.10) peut être écrite comme suit :

$$W(\psi_n^{L2}|x,p) = \frac{(N_n^{L2})^2}{\pi} \times [\mu(x)]^{2j-2n+l_1+l_2} \times \sum_{l_1=0}^{n} \sum_{l_2=0}^{n} \frac{(-1)^{l_1+l_2}}{l_1!\, l_2!} \times \binom{n+2(j-n)}{n-l_1} \binom{n+2(j-n)}{n-l_2} \underbrace{\int_0^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\mu\,(u+\frac{1}{u})} \times u^{l_1-l_2-2\,i\,p-1}\, du}_{I} \tag{3.11}$$

Pour calculer l'intégrale *I*on peut utiliser la relation donne dans la [29] suivante :

$$\int_0^{+\infty} u^{\nu-1}\, e^{-\frac{\beta}{u}-\gamma u}\, du = 2\left(\frac{\beta}{\gamma}\right)^{\frac{\nu}{2}} K_\nu(2\sqrt{\gamma}) \tag{3.12}$$

Alors l'intégrale *I*devient :

$$I = 2(1)\, K_{l_1-l_2-2\,i\,p}\left(2\sqrt{\frac{\mu^2}{4}}\right) \tag{3.13}$$

Par conséquent, l'équation (3.11) devient :

$$W(\psi_n^{L2}|x,p) = \frac{(N_n^{L2})^2}{\pi} \times [\mu(x)]^{2j-2n} \times \sum_{l_1=0}^{n} \sum_{l_2=0}^{n} \frac{(-\mu)^{l_1+l_2}}{l_1!\, l_2!} \times \binom{n+2(j-n)}{n-l_1} \binom{n+2(j-n)}{n-l_2} \times 2\, K_{l_1-l_2-2\,i\,p}(\mu(x)) \tag{3.14}$$

Finalement, la fonction de distribution de Wigner du deuxième cas de polynôme de Laguerre associée au potentiel de Morse et donnée par :

$$W(\psi_n^{L2}|x,p) = \frac{4\,n!\,(j-n)}{\pi\Gamma(2j-n+1)} \times [\mu(x)]^{2j-2n} \times \sum_{l_1=0}^{n} \sum_{l_2=0}^{n} \frac{(-\mu)^{l_1+l_2}}{l_1!\, l_2!} \times \binom{2j-n}{n-l_1} \binom{2j-n}{n-l_2} K_{l_1-l_2-2\,i\,p}(\mu(x)) \tag{3.15}$$

Ou $K_\nu$sont les fonctions de Bessel modifiés du troisième type et connues sous le nom de fonction de Macdonald[29]

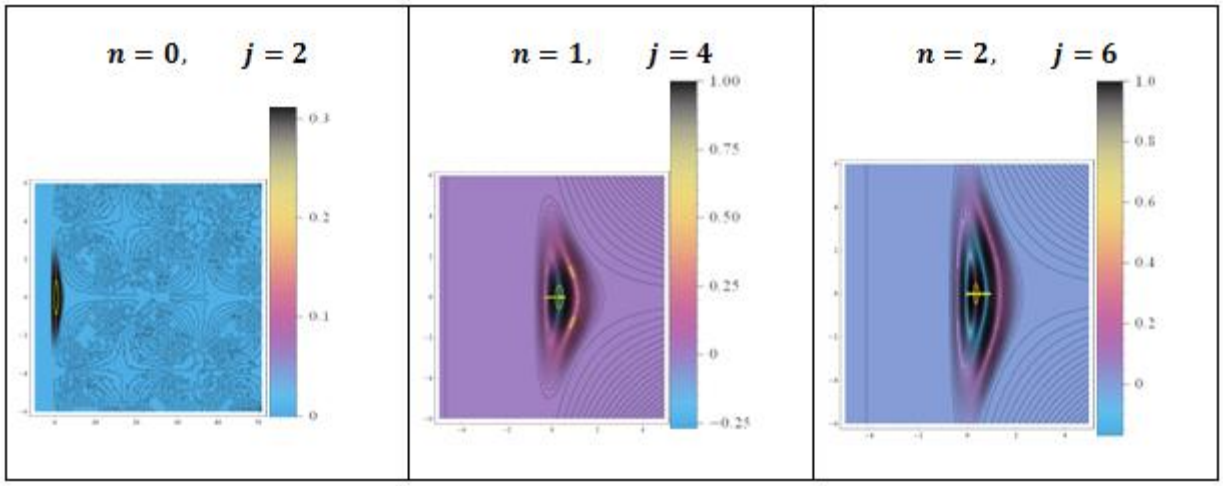


Figure 1: la fonction de distribution de Wigner bidimensionnelle de l'équation (3.15) tracée pour les valeurs de $n = 0,1,2$ en changeons à chaque fois la valeur de $j = 2,4\ et\ 6$ pour chaque état.

Discussion à propre de la figure :

On peut observer que la distribution de Wigner au cas de Morse est comme des cellules autour de x et p dans l'espace des phases avec une forme triangulaire, et confirment dans toutes les images l'inégalité$|W(\psi_n^{L2}|x,p)| \leq \frac{1}{\pi}$,(propriété intrinsèque de la distribution de Wigner).On peut voir que dans l'état fondamental $(n = 0)$ la fonction de Wigner est une même forme gaussienne comme cela devrait être dans tous les états fondamentaux avec un minimum localisé sur le plan (x,p).

Alors que les états excités ont une même forme gaussienne-déformée, il existe certaines régions où leurs valeurs sont négatives avec une concentration plus élevée. Au fur et à mesure que le nombre j augmente, les distributions de Wigner sont comprimées dans la direction x et dispersées de plus en plus sur la direction de l'impulsion p avec un léger déplacement vers la gauche.

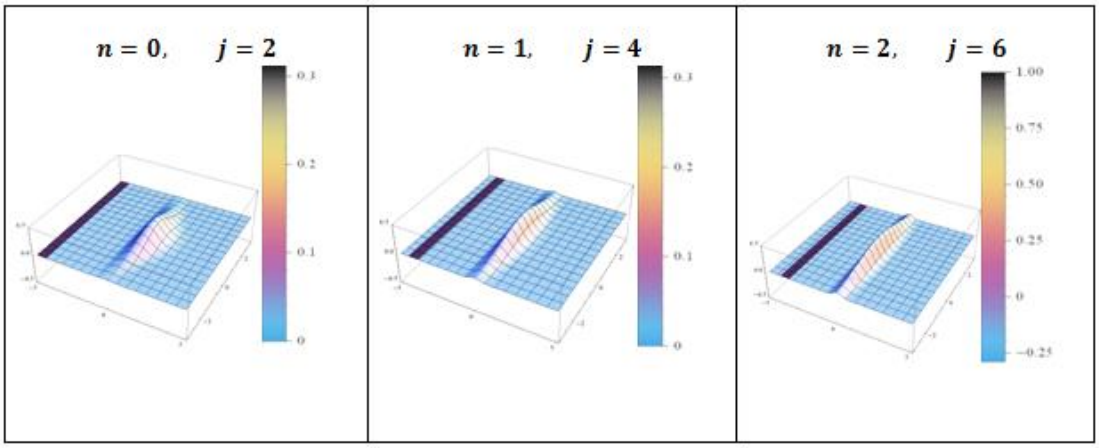


Figure 2 : la fonction de distribution de Wigner tridimensionnelle pour l'équation (3.15)

On suivi les mêmes étapes pour déterminer les deux restes cas de polynôme de Laguerre associées au potentiel d'oscillateur harmonique tridimensionnelle et de potentiel de Colomb tridimensionnelle respectivement, et nous obtient les deux équations suivantes :

- Pour le cas de polynôme de Laguerre associé au potentiel d'oscillateur Harmonique

$$W(\psi_n^{L3}|x,p) = \frac{1}{\pi}\frac{2n!}{\Gamma\left(l+\frac{3}{2}+n\right)} \times$$
$$\sum_{l_1=0}^{n}\sum_{l_2=0}^{n} \frac{(-1)^{l_1+l_2}\left(l+n+\frac{1}{2}\right)!\left(l+n+\frac{1}{2}\right)!\left((2x)^2\ \right)^{(l+1+l_1+l_2)}}{l_1!\,l_2!\,(n-l_1)!\left(l+l_1+\frac{1}{2}\right)!\,(n-l_2)!\left(l+l_2+\frac{1}{2}\right)!} \times \qquad (3.16)$$
$$K_{-2\,i\,p+\,l_1-\,l_2}(x^2)$$

Polynôme de Laguerre associé au potentiel de l'oscillateur harmonique

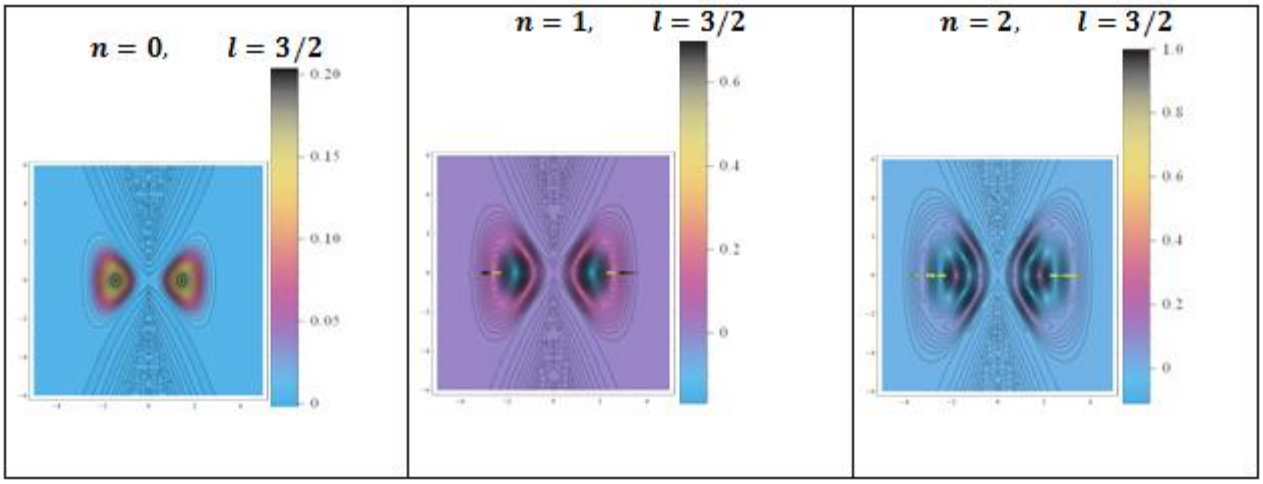


Figure 3 : la fonction de distribution de Wigner a deux dimensions pour l'équation (3.16) tracée pour les valeurs de $n = 0,1,2$

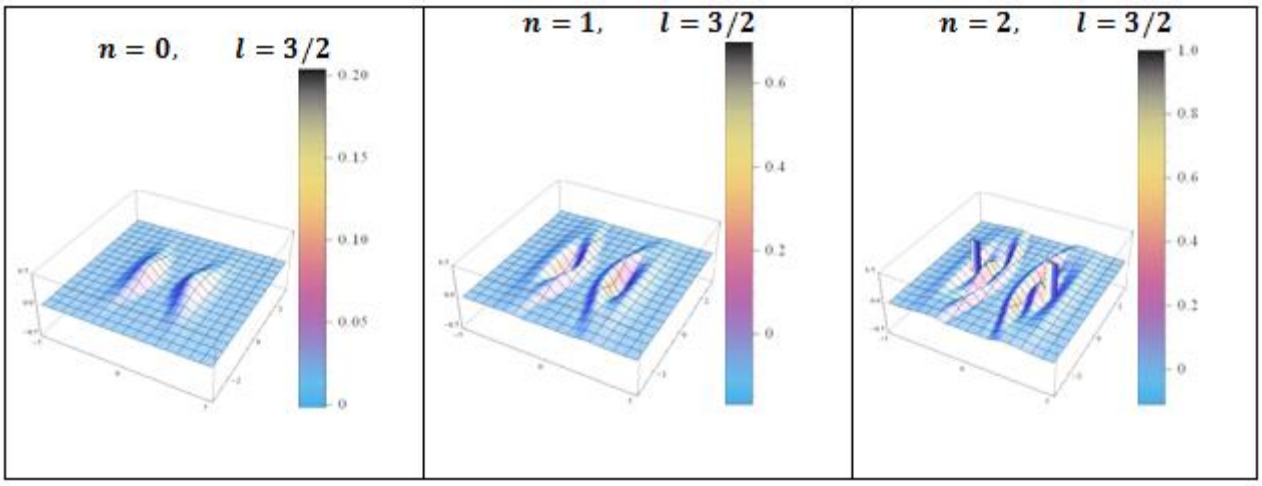


Figure 4 : la fonction de distribution de Wigner tridimensionnelle tracée pour l'équation (3.16)

- Pour le cas de polynôme de Laguerre associé au potentiel de Colomb tridimensionnelle

$$W(\psi_n^{L3}|x,p) = \frac{4}{\pi} \times \left(\frac{\Gamma(1+n)}{(l+n+1)\Gamma(2l+n+2)}\right) \times \sum_{l_1=0}^{n}\sum_{l_2=0}^{n} \frac{(-1)^{l_1+l_2}(2l+n+1)!\,(2l+n+1)!\left((2x)^2\right)^{\left(l+1+\frac{l_1}{2}+\frac{l_2}{2}\right)}}{l_1!\,l_2!\,(n-l_1)!\,(2l+l_1+1)!\,(n-l_2)!\,(2l+l_2+1)!} \times K_{-4\,i\,p-l_1+l_1}(2x) \tag{3.17}$$

Potentiel de coulomb avec une masse constante

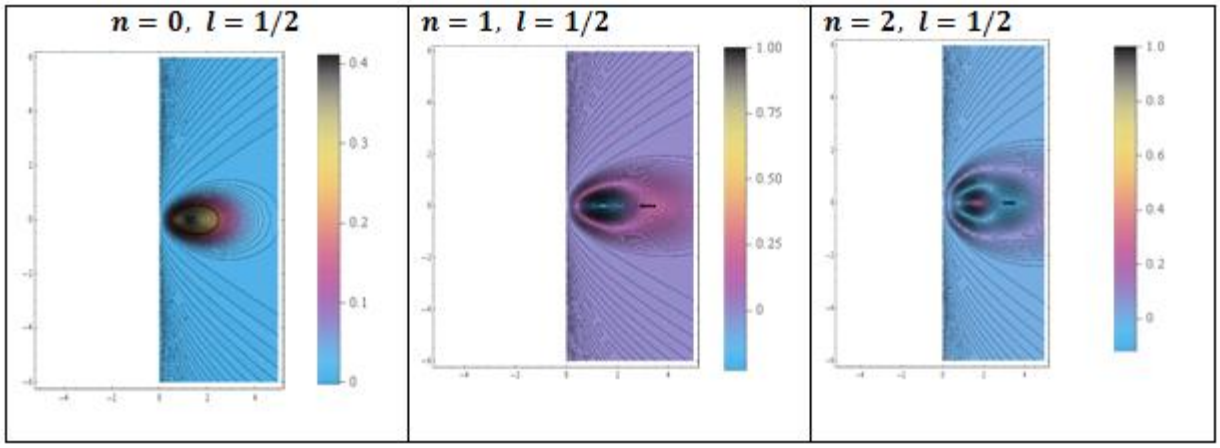


Figure 5 : la fonction de distribution de Wigner bidimensionnelle de l'équation (3.17) tracée pour les valeurs de $n = 0,1,2$

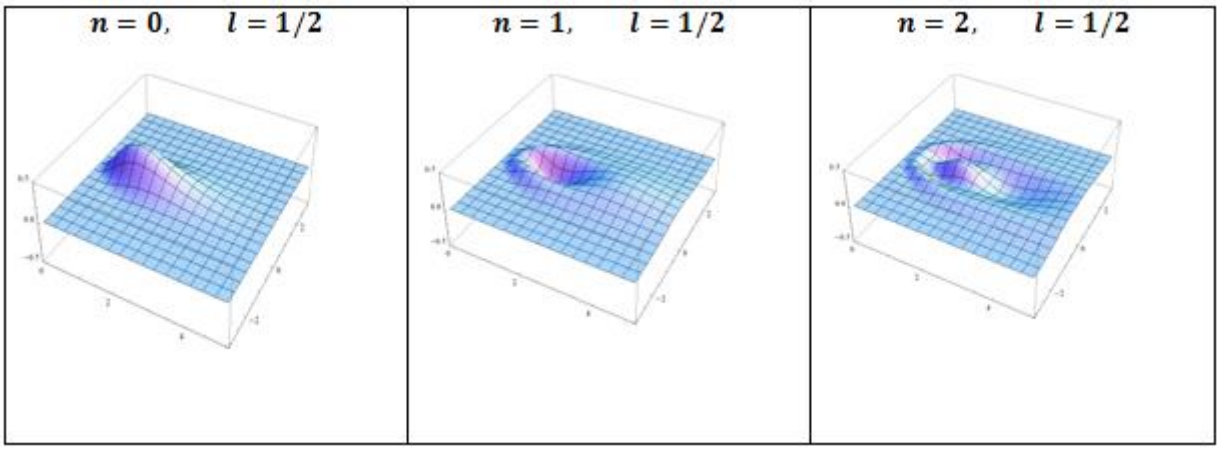


Figure 6 : la fonction de distribution de Wigner tridimensionnelle de l'équation (3.17)

Discussion à propre la figure 5 et 6 :

Les figures 5 et 6 montrent le comportement bidimensionnel et tridimensionnel de la fonction de Wigner du cas de polynôme de Laguerre associée au potentiel de Colomb, on remarque que les graphes prennent une forme elliptique pour l'état fondamental $n = 0$,mais ce forme tend vers a devient une pique à chaque fois on passe à un état existé plus élevéeà l'autre.se qui conséquent des régions négatives avec une concentration foncé .on peut bien voir ça dans les graphes a trois dimensions qui sont montrent les régions négatives dans les deux états excitées $n = 1,2$.

3.2.2 : la fonction de distribution de Wigner pour le polynôme d'Hermite

- **Cas 1 de polynôme d'Hermite :**

Lorsque la masse est constante,$m(x) = cte = 1 \rightarrow \mu(x) = x$

Rappelons que la fonction d'onde est donnée par :

$$\psi_H^1(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}\, n!\ 2^n}}\, e^{-\frac{1}{2}x^2} H_n(x) \tag{3.18}$$

Par l'utilisation de formule de la fonction de distribution de Wigner :

$$W(x,p) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, \psi^*\left(x - \frac{1}{2}y\right)\ \psi\ \left(x + \frac{1}{2}y\right) e^{i\,p\,y} \tag{3.19}$$

et en effectuant le changement de variable suivant :

$$\begin{Bmatrix} y = 2y' \,, dy = 2dy' \\ et \quad y' = y \end{Bmatrix}$$

En insérant l'équation (3.18) dans l'équation (3.19) on obtient :

$$W(\psi_n^{H1}|x,p) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\, n!\ 2^n}\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, e^{-\frac{1}{2}(x^2-y^2)-\frac{1}{2}(x^2+y^2)} H_n(x-y)H_n(x+y)e^{2i\,p\,y} \tag{3.20}$$

Et comme

$$-y^2 + 2i\,p\,y = -(y-ip)^2 - p^2 \tag{3.21}$$

On obtient :

$$W(\psi_n^{H1}|x,p) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\, n!\ 2^n}\frac{1}{\pi} e^{-(x^2-p^2)} \int_{-\infty}^{+\infty} dy\, e^{-(y-ip^2)} H_n(x-y)H_n(x+y) \tag{3.22}$$

On effectuant un autre changement de variable :

$$z = y - i\,p$$

Alors l'équation (3.22) devient :

$$W(\psi_n^{H1}|x,p) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\, n!\ 2^n}\frac{1}{\pi} e^{-(x^2-p^2)} \int_{-\infty}^{+\infty} dz\, e^{-z^2} H_n\,(x+z+ip)H_n\,(x-z-ip) \tag{3.23}$$

D'après la relation de [41] on a :

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(-x) \tag{3.24}$$

On déduit :

$$H_n\,(x-z-ip) = H_n\,(-x+z+ip) \tag{3.25}$$

Donc l'équation (3.23) devient :

$$W(\psi_n^{H1}|x,p) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi}\, n!\ \pi 2^n} e^{-(x^2-p^2)} \int_{-\infty}^{+\infty} dz\, e^{-z^2} H_n\,(z+(z+ip))H_n\,(z+(-x+ip\,)) \tag{3.26}$$

Enfin on intègre par l'utilisation de la relation suivante [29] :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz\, e^{-x^2} H_n\,(x+y)H_m(x+z) = 2\sqrt{\pi}\ m!\ z^{n-m}L_m^{n-m}(2yz) \tag{3.27}$$

Finalement on obtient la fonction de distribution de Wigner au cas polynôme d'Hermite associée au potentiel d'oscillateur harmonique comme suit :

$$W(\psi_n^{H1}|x,p) = \frac{(-1)^n}{\pi} e^{-(x^2-p^2)} L_n\,(2(x^2+p^2)) \tag{3.28}$$

Potentiel de l'oscillateur harmonique avec une masse constante

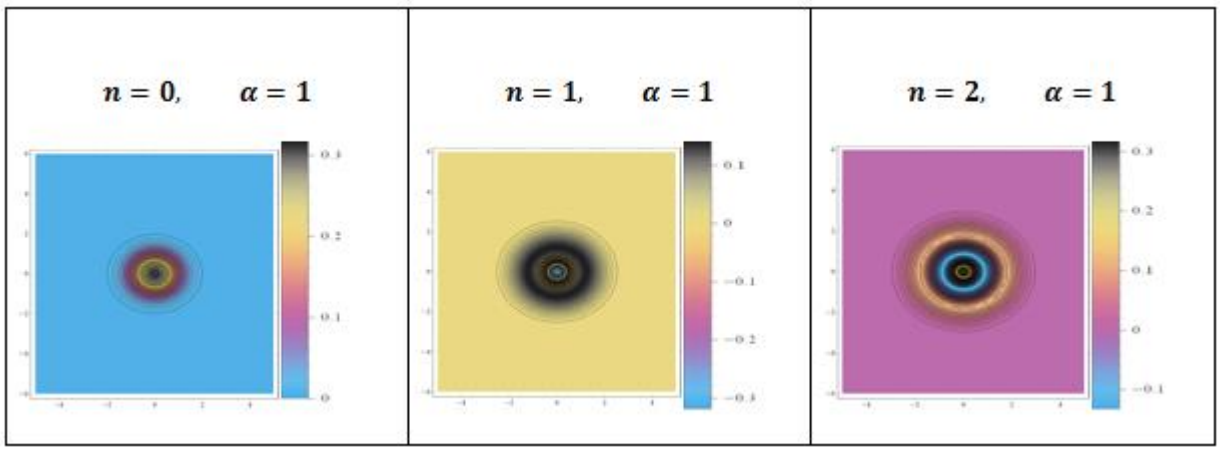


Figure 7 : la fonction de distribution de Wigner pour l'équation (3.28), tracés pour la valeur de $n = 0,1,2$ a deux dimension, les deux axes $x\ et\ y$ représentes respectivement la position et l'impulsion pour tous les schémas. L'obscurité affiche la valeur minimale tandis que la luminosité définit la valeur maximale

Discussion a propre la figure 7 :

La figure 7 représente la fonction de distribution de Wigner pourle cas de polynôme d'Hermite associée au potentiel d'oscillateur harmonique avec une masse constante. On peut distinguer bien que la forme de la densité de distribution de Wigner est de formecirculaire pour tous les états et centrée autour de point (0,0) par un pic maximum pour les valeurs paire de nombre quantique n et d'une valeur minimal pour les valeurs impaire.

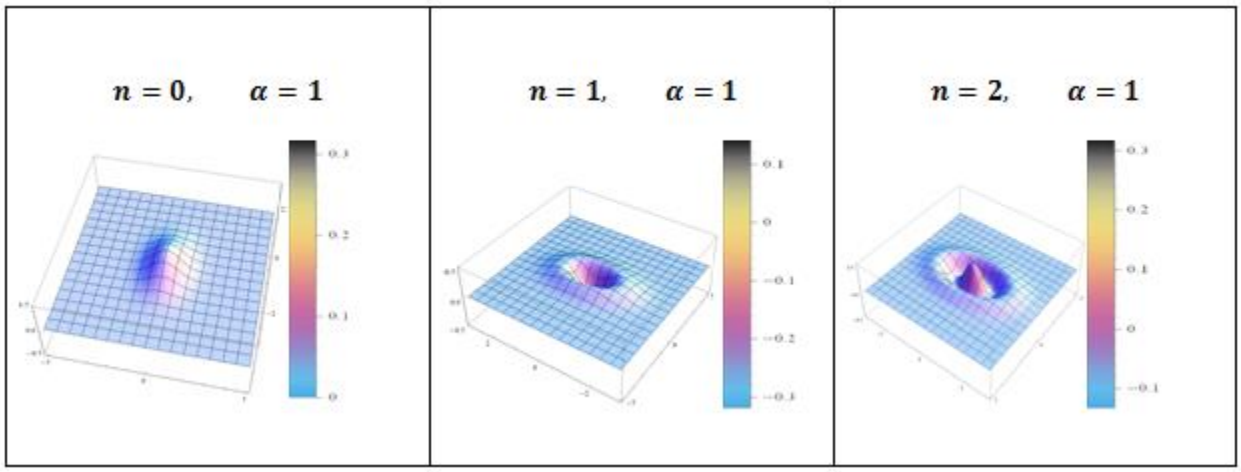


Figure 8 : la fonction de distribution de Wigner tridimentonnelle pour l'équation (2.38) tracé pour la valeur de $n = 1,2,3$.

Discussion a propre la figure 8 :

D'autre part, nous représentant les fonctions de distribution de Wigner tridimentonnelle pour le cas précédente, et on peut voir que la forme de ces distributions est gaussienne. Pour l'état fondamentale $n = 0$ la distribution est définie positive, alors que pour les deux restes états $n = 1\ et\ n = 2$la forme est Gaussienne déformée mais avec une valeur sont négatives pour certain région dans l'espace des phases.

En suivent les même étapes de calcul pour obtenir la fonction de Wigner pour le deuxième cas de polynôme d'Hermite lorsque la masse était variable, avec la valeur de la masse auxiliaire $\mu(x)$est donné par :

$$\mu(x) = \left(\frac{2}{\alpha}\right) e^{-\left(\frac{\alpha x}{2}\right)} \tag{3.30}$$

La fonction de distribution de Wigner est donnée par l'expression :

$$W(\psi_n^{H2}|x,p) = \alpha\mu[x]\frac{(-1)^n}{\pi} e^{-(\mu[x]^2-p^2)} L_n(2(\mu[x]^2+p^2)) \tag{3.31}$$

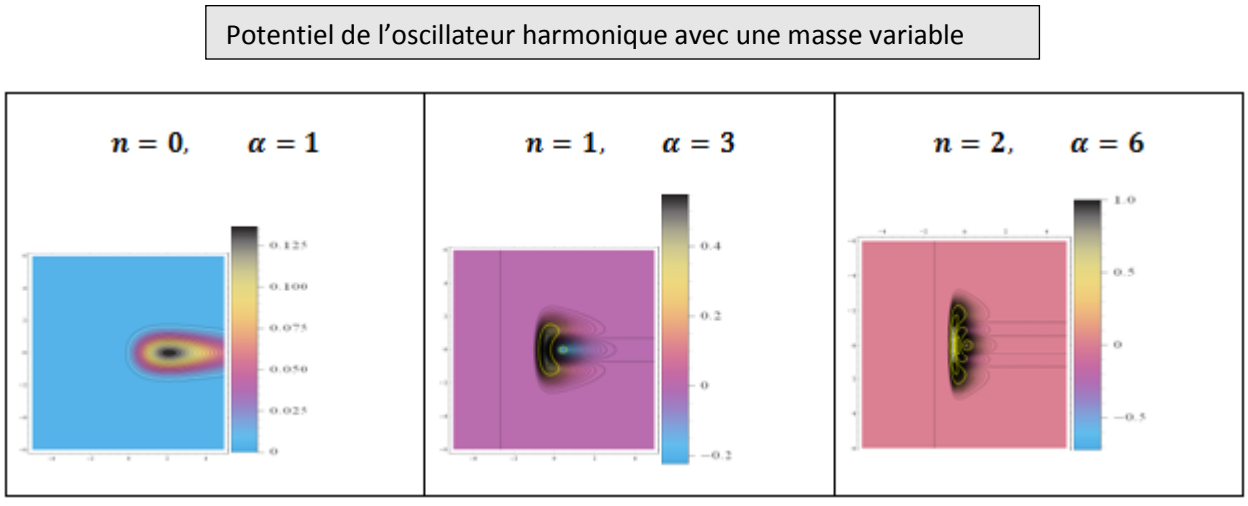


Figure 9: la fonction de distribution a deux dimensions pour l'équation (3.31), tracé pour les valeurs de $n = 0,1,2$ avec une valeur de α prend les valeurs $\alpha = 1,3,6\ et\ 9$

Discussion à propre la figure 9:

Les graphes représentent les fonctions des distributions de Wigner pour le polynôme d'Hermite associées au potentiel d'oscillateur Harmonique avec une masse variable, sont différant a ce qui vu précédemment concernant le cas où la masse était constante, la formes elliptiques et

gaussienne dans le cas fondamentale $n = 0$, les autres états ou $n = 1\ et\ 2$ ont des formes elliptiques déformées. Par rapport de nombre α augmente.

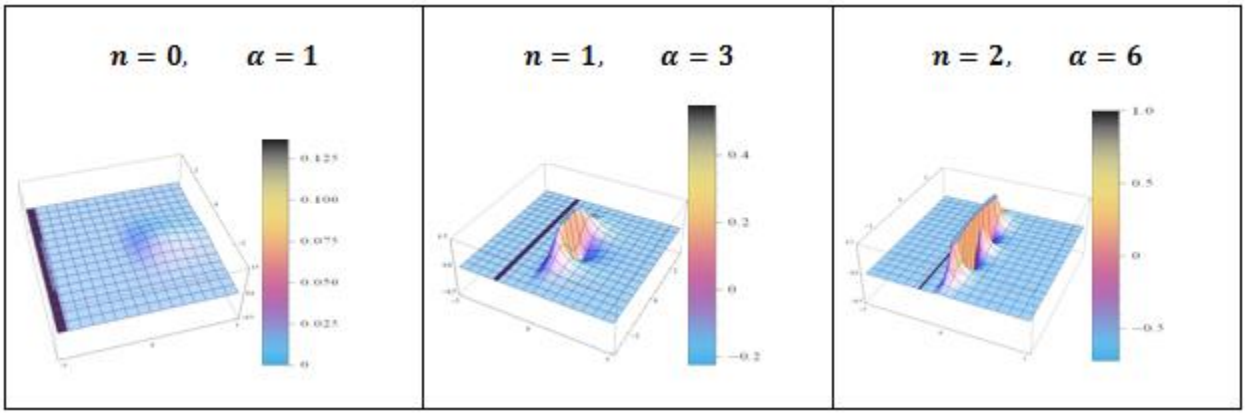


Figure 10 : la fonction de distribution de Wigner tridimensionnelle pour l'équation (3.31)

3.3 Les expression des valeurs moyenne via la fonction caractéristique:

Comme nous avons vu dans le chapitre trois la fonction caractéristique à deux variables $C(\sigma,\tau)$donnée par l'équation :

$$C(\sigma,\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, exp[i(\sigma\, x + \tau p)]\, W(q,p). \tag{3.32}$$

À partir des équations (3.32) nous avons déterminé les valeurs moyennes de position et impulsion à titre d'exemple.

Cas 1 : polynôme d'Hermite associée au potentiel d'oscillateur Harmonique :

Par intégration de l'équation (3.32) on obtient la fonction caractéristique $C(\sigma,\tau)$

$$C(\sigma,\tau) = e^{-\frac{(\sigma^2+\tau^2)}{4}} L_n\left(\frac{\sigma^2+\tau^2}{2}\right) \tag{3.33}$$

Alors Les valeurs du produit $\langle \hat{x}^m \hat{p}^l \rangle$peuvent être obtenues en utilisant la relation des dérivées mixtes de la fonction caractéristique comme suit [10] :

$$\langle \hat{x}^m \hat{p}^l \rangle = \int\int dpdq\, W(q,p) x^m p^l = \left(\frac{1}{i}\right)^{m+l} \frac{\partial^l}{\partial \tau^l} \frac{\partial^m C(\sigma,\tau)}{\partial \sigma^m}\bigg|_{\tau=\sigma=0} \tag{3.34}$$

A partir de cette dernière équation on trouve toutes les valeurs moyennes des moments $\langle \hat{x}^m \hat{p}^l \rangle$des opérateurs de position et de quantité de mouvement.

On a par exemple :

$$x = \frac{\partial C(\sigma,\tau)}{\partial \sigma} = \frac{1}{2} i e^{\frac{1}{4}(-\sigma^2-\tau^2)} \sigma L_n\left(\frac{1}{2}(\sigma^2+\tau^2)\right) + i e^{\frac{1}{4}(-\sigma^2-\tau^2)} \sigma {L^1}_{n-1}\left(\frac{1}{2}(\sigma^2+\tau^2)\right)$$
$$p = \frac{\partial C(\sigma,\tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{2} i e^{\frac{1}{4}(-\sigma^2-\tau^2)} \tau L_n\left(\frac{1}{2}(\sigma^2+\tau^2)\right) + i e^{\frac{1}{4}(-\sigma^2-\tau^2)} \tau {L^1}_{n-1}\left(\frac{1}{2}(\sigma^2+\tau^2)\right) \quad (3.35)$$

On obtient

$$\langle \hat{x} \rangle = \left.\frac{\partial C(\sigma,\tau)}{\partial \sigma}\right|_{\tau=\sigma=0} = \langle \hat{p} \rangle = \frac{\partial C(\sigma,\tau)}{\partial \tau} = 0$$
$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \left.\frac{\partial^2 C(\sigma,\tau)}{\partial \sigma^2}\right|_{\tau=\sigma=0} = \langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{\partial^2 C(\sigma,\tau)}{\partial \tau^2} = \frac{2n+1}{2} \quad (3.36)$$

En suivant les procédures de dérive supérieure sur la fonction caractéristique on obtient tous les moments$\langle \hat{x}^m \hat{p}^l \rangle$.D'après la relation des écarts quadratiques etles résultats des valeurs moyennes précédents, on constate directement que le principe d'incertitude de Heisenberg est toujours vérifié

$$(\Delta \hat{x})_{\mathcal{H},n} \cdot (\Delta \hat{p})_{\mathcal{H},n} \equiv \left(n + \frac{1}{2}\right). \ (n = 0,1,2,\cdots). \quad (3.37)$$

Cas 2 polynôme de Laguerre associée au potentiel de morse :

On utilise la relation donnée par l'équation (3.32), La fonction caractéristique au cas de potentiel de Morse est donnée par

$$C(\sigma,\tau) = \sum_{l_1=0}^{n} \sum_{l_2=0}^{n} \gamma_{l_1,l_2}^{n,N} \, 2^{\beta'} \frac{e^{-\alpha'\tau}}{(1+e^{-\tau})^{\beta'}} \Gamma(\beta' - i\sigma) \, e^{i\,\lambda\,\sigma} \quad (3.38)$$

Où

$$\beta' = 2(N-n) + l_1 + l_2$$
$$\alpha' = (N-n) + l_1$$
$$\lambda = ln\left(\frac{(2N+1)(1+e^{-\tau})}{2\, e^{-\frac{\tau}{2}}}\right) \quad (3.39)$$

A partir de l'équation (3.33) lorsque $n = 0$ et $N = 1$ on obtient

$$\langle \hat{p} \rangle = \frac{\partial C(\sigma,\tau)}{\partial \tau} = 0$$
$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \left.\frac{\partial^2 C(\sigma,\tau)}{\partial \sigma^2}\right|_{\tau=\sigma=0} = 1.101677 \quad (3.40)$$
$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{\partial^2 C(\sigma,\tau)}{\partial \tau^2} = (N-n)\left(\frac{2n+1}{2}\right) = \frac{1}{2}$$

Dans ce cas de l'état fondamental on constate directement que le principe d'incertitude est vérifié la relation suivante

$$(\Delta\hat{x})_{1,0} \cdot (\Delta\hat{p})_{1,0} = 0.56786, \qquad (n = 0, N = 1). \tag{3.41}$$

Dans l'état fondamentale nous pouvons observer que le principe des incertitudes elles changent progressivement au fur et à mesure que N augmente, et à la fin s'approche à la valeur $(1/2)$ lorsque $N \to \infty$, c'est-à-dire le principe d'incertitude est borné, $1/2 < (\Delta\hat{x})_{0,N} \cdot (\Delta\hat{p})_{0,N} < 4/7$, ce qui suggère que $(\Delta\hat{x})_{0,N} \cdot (\Delta\hat{p})_{0,N}$est presque à son minimum. Par exemple, quand $N = 10^4 \gg 1$, on

Peut observer que dans le cas de potentiel du Morse,$(\Delta\hat{x})_{0,N} \cdot (\Delta\hat{p})_{0,N}$ s'approche de la valeur minimum $1/2$ (L'inégalité de Heisenberg est saturée). Implique que dans la limite $N \to \infty$ on à

$$(\Delta\hat{x})_{\infty,0} \cdot (\Delta\hat{p})_{\infty,0} = \frac{1}{2}. (n = 0, N = \infty). \tag{3.42}$$

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons déterminé analytiquement et numériquement les fonctions de distribution de Wigner pour des états propres qui sont fonctions des polynômes d'Hermite et de Laguerre généralisés. En utilisant une méthode basée sur la transformation des coordonnées, nous avons constaté que les fonctions de distribution de Wigner au cas de polynômes Laguerre ont une forme triangulaire dans l'espace des phases, différente des cercles de celle obtenue dans le cas d'Hermite. Ces formes varient pour différents choix de la fonction d'ondes ainsi par rapport aux paramètres associés aux polynômes d'Hermite et de Laguerre généralisés.

Nous avons observé que les fonctions de distribution de Wigner dans l'espace des phases, sont comprimées dans la direction x ou localisée en position x et dispersées de plus en plus dans la direction d'impulsion p, par rapport la variation des ces paramètres associés aux polynômes d'Hermite et de Laguerre généralisés, avec un léger déplacement dans la direction des positions x.

En déterminant par la suite les valeurs moyennes via la fonction caractéristique qui a été trouvé par la transformée de Fourier de la distribution de Wigner dans l'espace des phases, pour évaluer l'écart quadratique de ces derniers, afin de vérifier la relation d'incertitude de Heisenberg.

Il serait intéressant d'étendre le présent travail pour considérer des autres solutions, exprimées en termes de polynômes d'Hermite, Laguerre multi-dimensionnelle et de Jacobi et ce, avec des profils différents de la fonction d'onde, adaptée à certains types de potentiels physique.

Dans une étude future, nous envisagerons également d'appliquer ce traitement à un système quantique multi-dimensionnel et un système quantique ayant une masse effective dépendante de la position.

Nous pouvons conclure que la représentation de Wigner et la transformation de Weyl dans l'espace des phases, sont largement utilisées pour ramener les calculs quantiques à un simple calcul probabiliste classique, très souvent moins complexe. Ceci nous facilite énormément l'étude de certains phénomènes quantiques.

Références

[1] E. Wigner, *On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium*, Phys. rev.40, 749 (1932).

[2] JU.G.-X, C.-Y. Cai, Y. X-yang, and Z.-Z. REN, *Coordinate Transformation and Exact Solutions of Schrödinger Equation with Position- Dependent Effective Mass*, Commun. Theor. Phys.47, 1001-1009 (2007). JU.G.-X,*Non- hypergeometric Type of Polynomials and Solutions of Schrödinger Equation with Position -Dependent Mass*, Commun.Theor. Phys. 56, 235-240 (2011).

[3] W. B. Case, *Wigner functions and Weyl transforms for pedestrians* Am. J. Phys.**7**6, 937 (2008). H. Y. Fan, H. C. Yuen, G. C. Cai, and N. Q. Jiang, *Operators' ordering: from Weyl ordering to normal ordering*, Sci. China Phys. Mech. Astronomy. 54, 1394-1397 (2011). Sybren de Groot, *La transformation de Weyl et la fonction de Wigner: une forme alternative de la mécanique quantique*, (1974). Les Presses de l'Université de Montréal C.P. 6128, Montréal 101, Canada.

[4] J. Hancock, M. A. Walton, and B. Wynder, *Quantum mechanics another way*, Eur. j. Phys.25.525-534 (2004).J. E. Moyal, *Quantum mechanics as a statistical theory*. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 45 (01), 99-124, (1949).

[5] B. Bagchi, A. Banerjee, C. Quesne, and V. M.Tkachuk, *Deformed shape invariance and exactly solvable Hamiltonians with position-dependent effective mass*, J. Phys. A. Math. Gen. 38, 2929 (2005).

[6] C. Quesne, *Point Canonical Transformation versus Deformed Shape Invariance for Position-Dependent Mass Schrödinger Equations*, SIGMA **5**, 046 (2009).

[7] A. Ganguly, S. Kuru, J. Negro, and L. M. Nieto, *A study of the bound states for square potential wells with position-dependent mass*, Phys. Lett. A 360, 228-233 (2006).

[8] S. Cruz y Cruz, J. Negro, and L. M. Nieto, *On position-dependent mass harmonic oscillators*, J. Phys. Conf. Ser. 128, 012053 (2008). S. Cruz y Cruz, J. Negro, and L. M. Nieto**,** *Classical and quantum position-dependent mass harmonic oscillators*, Phys. Lett. A 369, 400 (2007).

[9] A. A. Suzko and A. Schulze-Halberg, *Intertwining operator method and supersymmetry for effective mass Schrödinger equations*,Phys. Lett. A 372, 5865 (2008). A. Schulze-Halberg, *effective mass Hamiltonians with linear terms in the momentum: darboux transformations and form-preser ving transformations*, Int. J. Mod. Phys. A 22, 1735 (2007).

[10] F. Cannata, M. V. Ioffe, and D. N. Nishnianidze, *Two-dimensional Schrödinger Hamiltonians with effective mass in SUSY approach*, Ann. Phys. 323, 2624 (2008).

[11] R. A. Kraenkel and M. Senthilvela, *On the solutions of the position-dependent effective mass Schrödinger equation of a nonlinear oscillator related with the isotonic oscillator*, J.Phys. A. Math. Theor. 42, 415303 (2009).

[12] B. Midya and B. Roy, *Exceptional orthogonal polynomials and exactly solvable potentials in position dependent mass Schrödinger Hamiltonians*, Phys. Lett. A 373, 4117 (2009).

[13] G. Lévai and O. Özer, *An exactly solvable Schrödinger equation with finite positive position-dependent effective mass*, J. Math. Phys.51, 092103 (2010).

[14] J. P. Killingbeck, *The Schrödinger equation with position-dependent mass*, J. Phys. A. Math.Theor.44, 285208 (2011).

[15] S. H. Mazharimousavi, *Revisiting the displacement operator for quantum systems with position-dependent mass* ,Phys. Rev. A 85, 034102 (2012).

[16] R. Bravo and M. S. Plyushchay, *Position-dependent mass, finite-gap systems, and supersymmetry*, Phys. Rev. D 93,105023 (2016).

[17] L. Dekar, L. Chetouani, and T.F. Hammann, *An exactly soluble Schrödinger equation with smooth position-dependent mass*, J. Math. Phys. 39, 2551 (1998).

[18] L. Dekar, L. Chetouani, and T.F. Hammann, *Wave function for smooth potential and mass step*, Phys. Rev. A 59 , 107 (1999).

[19] S.-H. Dong, *Factorization Methods in Quantum Mechanics, Book*, (Springer, Dordrecht, (2007).

[20] Shi-Hai Dong, *Factorization method in quantum mechanics, Book*, (2007). Springer.

[21] S.-A. Yahiaoui and M. Bentaiba, *A Group-Theoretical Method for Natanzon Potentials In Position-Dependent Mass Background by Means of Conformal Mappings*, Int. J. Theor.Phys.48, 315 (2009).

[22] B. Roy and P. Roy, *A Lie algebraic approach to effective mass Schrödinger equations*, J. Phys. A. Math. Gen. 35, 3961 (2002).

[23] R. Koc, and M. Koca, *A systematic study on the exact solution of the position dependent mass Schrödinger equation* , J. Phys. A. Math. Gen. 36, 8105 (2003).

[24] O. Von Roos, *Position dependent effective masses in semiconductor theory*. Phys. Rev. B 27, 7547 (1983).

[25] A.de Souza. Dutra, C.A.S. Almeida, *Exact solvability of potentials with spatially dependent effective masses*, Physics Letters A275, 25-30 (2000).

[26] D. J. BenDaniel and C. B. Duke, *Space-Charge Effects on Electron Tunneling*, Phys. Rev.152, 683 (1966).

[27] G. Lévai. *Asearch for shape -invariant potentials*. J. Phys. A. Gen 689-702(1989). A.R palastino, A.gigo, M.Casas, F.Garcias, and A. Plastino, *Supersymmetric approach to quantum systems with position-dependent effective mass*, Phys Review A 6 (1999).

[28] O.cherroud. Mécanique quantique PT symétrique et hamiltonien à masse variable, *doctorat* en sciences, (2018).

[29] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products (Academic Press, New York*, (2007).