RÉPUBLIQUE ALGERIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEURE ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ DE MEDEA

FACULTÉ DES SCIENCES



Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de :

Master en Physique

Spécialité : Physique Théorique

Par :

Lahreche Asmaâ-Adel Amani

Thème :

Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée à des systèmes à masses dépendant de la position par la méthode de Nikiforov-Uvarov

---

Soutenu publiquement, le ../09/2020, devant le jury composé de:

Dr MEKHTICHE Abdelhalim	MCB	Université de Médéa	Président
Dr CHERROUD Othmane	MCB	Université de Médéa	Examinateur 1
Mme HATTOU Souad	MAA	Université de Médéa	Examinatrice 2
Dr DEKAR Liès	MCA	Université de Médéa	Encadreur

Année universitaire : 2019 / 2020

Résumé

Notre mémoire s'intéresse à l'étude de l'équation de Schrödinger ordinaire avec une masse constante et à sa généralisation pour une masse dépendante de la position. On donne la résolution analytique découlant de l'hamiltonien de von Roos

$$H = \frac{1}{4}(m^{\alpha}pm^{\beta}pm^{\gamma} + m^{\gamma}pm^{\beta}pm^{\alpha}) + V,$$

pour des barrières rectangulaires simples et doubles en masse et en potentiel. Puis, nous implémentons la méthode de Nikiforov-Uvarov, conçue initialement pour une nouvelle construction de la théorie des fonctions spéciales (1988), pour la résolution des équations non relativiste de Schrödinger pour le potentiel de Morse, et relativistes de Klein-Gordon et de Dirac pour un champ coulombien avec une masse constante. Enfin, nous présentons la résolution de l'équation de Schrödinger généralisée par la méthode de Nikiforov-Uvarov pour les deux potentiels de Morse et de Morse déformé en q et avec des masses dépendantes de la position. En particulier l'approximation de Perkis a été utilisée pour estimer le terme centrifuge.

Mots clés :

Equation de Schrödinger Généralisée, Masse Dépendant de la Position (MDP), Méthode de Nikiforov-Uva[redacted]amiltonien de von Roos

$$H = \frac{1}{4}(m^{\alpha}pm^{\beta}pm^{\gamma} + m^{\gamma}pm^{\beta}pm^{\alpha}) + V,$$

pour des barrières rectangulaires simples et doubles en masse et en potentiel. Puis, nous implémentons la méthode de Nikiforov-Uvarov, conçue initialement pour une nouvelle construction de la théorie des fonctions spéciales (1988), pour la rés[redacted]des équatio[redacted]tiel de Morse, et relativistes de Klein-Gordon et de Dirac pour un champ coulombien avec une masse constante. Enfin, nous présentons la résolution de l'équation de Schrödinger [redacted]e par la méthode de Nikiforov-Uvarov pour les deux potentiels de Morse et de Morse déformé en q et avec des masses dépendantes de la position. En particulier l'approximation de Perkis a été utilisée pour estimer le terme centrifuge.

Mots clés :

[redacted]

Abstract

Our memory is interested in the study of the ordinary Schrödinger equation with constant mass and its generalization for a position dependent mass. We give the analytical resolution arising from the hamiltonian of von Roos

$$H = \frac{1}{4}(m^{\alpha}pm^{\beta}pm^{\gamma} + m^{\gamma}pm^{\beta}pm^{\alpha}) + V,$$

for single and double rectangular barriers in mass and potential. Then, we implement the Nikiforov-Uvarov method, initially designed for a new construction of the theory of special functions (1988), for solving the non relativistic Schrödinger equations for the Morse potential, and relativistic Klein-Gordon and Dirac for a Coulomb field with constant mass. Finally, we present the resolution of the generalized Schrödinger equation by the Nikiforov-Uvarov method for Morse potential and deformed Morse potential in q and with position dependent masses. In particular, the Perkis approximation was used to estimate the centrifugal term.

Key Words :

Generalized Schrödinger Equation, Position Dependant Mass (PDM), Nikiforov-Uvarov Method (NU Method), Morse Potential, Deformed Morse Potential in q, Perkis Approximation.

Remerciements

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

Nous tenons, avant tout à exprimer notre profonde gratitude à monsieur DEKAR Liès, notre promoteur. Nous le remercions pour sa gentillesse et sa disponibilité. Nous avons eu le grand plaisir de travailler sous sa supervision.

Nos profonds remerciements vont aux membres du jury : Dr MEKHTICHE Abdelhalim qui a accepté d'assurer la présidence du Jury, Dr CHERROUD Othmane et Mme HATTOU Souad, qui nous nous ont fait l'honneur d'examiner notre mémoire.

Aussi, nos remerciements vont également à tous les enseignants du Département des Sciences de la Matière et en particulier à ceux qui ont intervenus en Master de Physique Théorique. Sans oublier une pensée à nos camarades de la promotion 2019/2020 en souvenir des moments passés ensemble.

Dédicaces

Lahreche Asmaâ dédie ce travail à :

Sa très chère mère pour ses encouragements et ses prières tout au long de ses études.

Son très cher père pour tout ce qu'il a fait pour qu'elle puisse arriver à ce résultat.

Son frère Younes et sa petite sœur Somia.

À toute sa petite Famille, et surtout à sa chère tante N. Boucherit.

À tous ses amis, spécialement Meriem Seder, Ch. Aichaoui et à ses enseignants sans exception.

Adel Amani dédie ce travail :

À ses parents qui ont vraiment souffert pour elle.

À ses frères et sœurs.

À sa grande famille ADEL.

À ses enseignants et amis sans citer les noms.

Table des Matières

Introduction **10**

1 L'équation de Schrödinger généralisée **11**

1.1 Rappel sur la mécanique quantique : 11

1.1.1 L'équation de Schrödinger ordinaire $m = cte$ 11

1.1.2 L'équation de Schrödinger généralisée $m = m(x)$ 19

1.2 Conclusion 42

2 La méthode Nikiforov -Uvarof **43**

2.1 Introduction 43

2.2 Définition 43

2.3 L'équation différentielle pour les fonctions spéciales de la physique 44

2.4 L'application de la méthode de Nikiforov -Uvarov 51

2.4.1 Résolution de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse . 51

2.4.2 Résolution de l'équation de Klein-Gordon pour le champ coulombien 56

2.4.3 Résolution de l'équation de Dirac pour le champ coulombien 59

3 Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée à des systèmes à masses dépendant de la position **72**

3.1 Introduction 72

3.1.1 Cas d'un potentiel de Morse 73

3.1.2 Cas d'un potentiel de Morse déformé en q 81

Conclusion **88**

Introduction

Les systèmes avec une masse dépendant de la position (Position Dependent Mass ≡PDM) ont attiré beaucoup d'attention et ont inspiré d'intenses activités de recherche au cours des dernières années. Ils sont en effet très utiles dans l'étude de nombreux problèmes physiques, tels que les propriétés électroniques des semi-conducteurs [1] et des points quantiques [2], des noyaux[3], des liquides quantiques[4], de la matière condensée[5 − 6] et dans d'autres domaines connexes, Dans les recherches théoriques, de nombreuses méthodes développées pour l'étude des systèmes à masse constante ont été généralisées pour les systèmes PDM aboutissant à un certain nombre de nouveaux résultats très intéressants.

La recherche de solutions exactes de l'équation de Schrödinger avec une PDM est devenue un sujet de recherche intéressant car de telles solutions peuvent fournir une compréhension conceptuelle de certains phénomènes physiques, ainsi qu'un terrain d'essai pour certains schémas d'approximation.

Les solutions exactes de l'équation de Schrödinger avec masse effective dépendant de la position et pour certaines formes de potentiels physiques ont beaucoup attiré l'attention ces dernières années [7].

Pour un système à masse dépendant de la position, les opérateurs masse et impulsion ne commutent plus. Se pose le problème du choix de l'ordre correct des opérateurs masse et impulsion dans l'opérateur énergie cinétique de l'hamiltonien effectif. Cette question est directement liée aux conditions de continuité de la fonction d'onde à travers une jonction abrupte [8]. von Roos [15] a été le premier à suggérer l'hamiltonien effectif général suivant :

$$H = \frac{1}{4}(m^{\alpha}pm^{\beta}pm^{\gamma} + m^{\gamma}pm^{\beta}pm^{\alpha}) + V$$

où α, β et γ sont des paramètres, qui vérifient $\alpha+\beta+\gamma = -1$, souvent appelés paramètres d'ambiguïté.

Notre principal objectif dans ce mémoire, porte sur la résolution de l'équation de Schrödinger

généralisée à des systèmes à masses dépendant de la position par la méthode de Nikiforov-Uvarov. Ce travail est organisé en trois chapitres, structuré comme suit : Le premier concerne un rappel sur la mécanique quantique, en particulier la résolution de l'équation de Schrödinger ordinaire non relativiste. Puis nous passons en revue différents travaux remarquables qui ont portés ces dernières années sur les systèmes quantiques à masses dépendant de la position. On y présente la résolution de l'équation de Schrödinger généralisée indépendant du temps et l'on donne les coefficients de transmission et de réflexion pour les cas de barrières rectangulaires simples et doubles en potentiel et en masse.

Dans le second chapitre, nous expliquons en détails les différentes étapes de la méthode de Nikiforov-Uvarov, qui a montré dernièrement un grand succès dans le traitement analytique d'un grands nombre de problèmes quantiques relativiste ou non relativiste. Comme applications de cette méthode nous proposons le cas d'un potentiel de Morse abordé par l'équation de Schrödinger ordinaire, puis le cas du potentiel de Coulomb traité via les équations de Klein-Gordon et de Dirac.

Le troisième chapitre, présente l'essentiel de notre travail. Nous y détaillons la résolution de l'équation de Schrödinger généralisée à des systèmes à masses dépendant de la position. Comme cas particulier nous avons opté pour la résolution détaillée via la méthode de Nikiforov-Uvraov de l'équation de Schrödinger généralisée pour les potentiels de Morse et de Morse déformé en q avec des masses dépendant de la position. Nous présentons les résultats des valeurs propres de l'énergie et des fonctions d'ondes radiales normalisées. Enfin on achève notre mémoire par une conclusion générale.

Chapitre 1

L'équation de Schrödinger généralisée

1.1 Rappel sur la mécanique quantique :

La mécanique quantique est un outil indispensable pour décrire et étudier les phénomènes physiques qui se manifestent à l'échelle atomique et subatomique. Elle est communément subdivisée en mécanique quantique non relativiste qui trouve une large application dans beaucoup de problème de physique atomique et de chimie moléculaire où les énergies ne sont pas trop élevées. Pour les phénomènes relevant du domaine des hautes énergies, comme les interactions nucléaires, la mécanique quantique non relativiste s'avère non adéquate et il faut faire appel à la théorie quantique relativiste. Cette dernière se subdivise en fonction du spin de la particule. Dans le cas d'un spin nul elle mène à l'équation de Klein –Gordon, et pour des spins demi-entiers à l'équation de Dirac [9].

En mécanique quantique, l'étude d'un système microscopique est basée sur la résolution d'une équation différentielle non relativiste proposée par le savant : Schrödinger, cette équation c'est celle qu'on appelle aujourd'hui l'équation de Schrödinger.

L'équation de Schrödinger est une équation différentielle du deuxième ordre par rapport à la position du système et du premier ordre par rapport au temps, aussi c'est l'équation fondamentale de la mécanique quantique non relativiste.

On distinguera deux cas à étudier dans ce chapitre, le premier lorsque la masse est constante $m = m^{cte}$ et le deuxième quand celle-ci dépend de la positition $m = m(x)$.

1.1.1 L'équation de Schrödinger ordinaire $m = cte$

L' équation de Schrödinger lorsque sa masse est constante à été proposée par le physicien autrichien Erwin Schrödinger en 1925, En mécanique quantique non-relativiste, le mouvement

d'une particule libre de masse m, de vecteur impulsion $\overrightarrow{p}$, d'énergie E et de fonction d'onde $\psi(\overrightarrow{r},t)$est décrit par l'équation de Schrödinger [10] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\overrightarrow{\nabla^2}\psi(\overrightarrow{r},t)=i\hbar\frac{\partial\psi(\overrightarrow{r},t)}{\partial t} \tag{1.1}$$

En effet a partir de la relation énergie-impulsion classique décrivant le mouvement d'une particule de masse m, d'impulsion $\overrightarrow{p}$ et d'énergie cinétique E :

$$\frac{\overrightarrow{p}^2}{2m}=E=T=E_c \tag{1.2}$$

on peut obtenir l'équation de Schrödinger en remplaçant le vecteur impulsion et l'énergie par les opérateurs suivants qui s'appliquent à la fonction d'onde $\psi(\overrightarrow{r},t)$:

$$\overrightarrow{p}\rightarrow-i\hbar\overrightarrow{\nabla}\text{et }E=i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{1.3}$$

soit donc, en appliquant ces opérateurs à la fonction d'onde $\psi(\overrightarrow{r},t)$ qui représente la particule :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\overrightarrow{\nabla^2}\psi(\overrightarrow{r},t)=i\hbar\frac{\partial\psi(\overrightarrow{r},t)}{\partial t} \tag{1.4}$$

Comme on se placera dans la suite dans le système d'unité naturel i. e. $\hbar=c=1$, l'équation de Schrödinger s'écrit dans ce cas :

$$-\frac{1}{2m}\overrightarrow{\nabla^2}\psi(\overrightarrow{r},t)=i\hbar\frac{\partial\psi(\overrightarrow{r},t)}{\partial t} \tag{1.5}$$

L'opérateur $\frac{\hbar^2}{2m}\overrightarrow{\nabla^2}$ correspond à l'hamiltonien décrivant le mouvement d'une particule libre de masse m, de vecteur impulsion $\overrightarrow{p}$ et d'énergie E.

L'équation de Schrödinger est :

1-une équation linéaire et homogène en $\psi(\overrightarrow{r},t)$. Par conséquent elle prend en compte le principe de superposition (les solutions peuvent être ajoutées en amplitude et en phase pour pouvoir reproduire le phénomène d'interférence) .

2- du premier degré par rapport au temps. Cette condition est nécessaire pour que l'état du système représenté par $\psi(\overrightarrow{r},t_0)$ à l'instant t_0 détermine son état à tout instant ultérieur t.

3- La fonction d'onde $\psi(\overrightarrow{r},t)$ doit satisfaire les conditions suivantes:

-elle doit être continue.

-elle ne doit pas prendre des valeurs infinies.

-la dérivée de $\psi(\overrightarrow{r},t)$ par rapport à la position doit être continue.

-elle doit être normalisée c'est-à-dire : $\int \psi^*(\overrightarrow{r},t)\psi(\overrightarrow{r},t)\,\overrightarrow{dr} = 1$.

Marche de potentiel

1.png

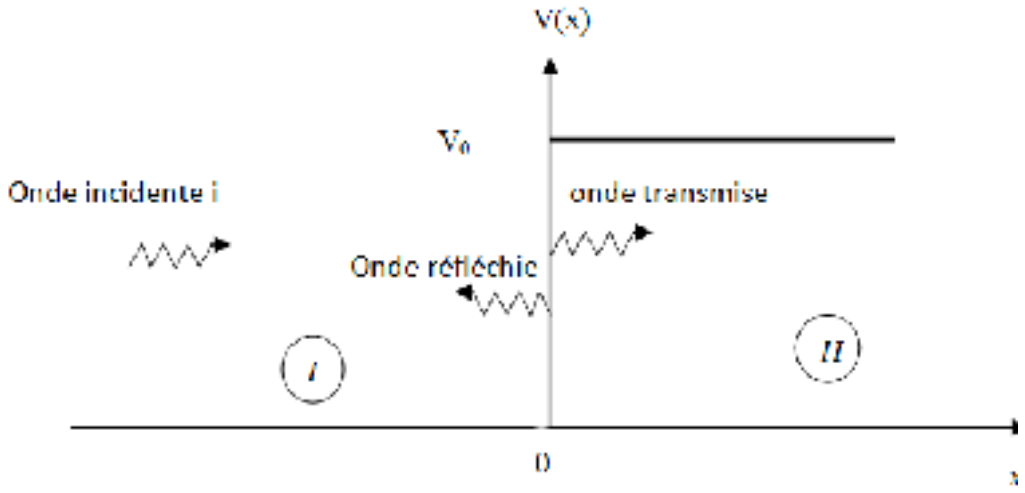


Figure -1-

soit une particule incidente dans la direction z, qui subit l'effet d'une marche de potentiel $V(x)$ fonction constante dans certaines régions de l'espace. Pour un tel potentiel, la fonction d'onde à variables séparées, $\psi(x,t) = \varphi(x)e^{-i\omega t}$ décrivant l'état de la particule obéit à l'équation de Schrödinger.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) \tag{1.6}$$

On peut encore écrire l'équation (1.6)sous la forme d'une équation aux valeurs propres

$$E\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t) \tag{1.7}$$

où $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} + V(x)$ et $E = \hbar\omega$

Qui pour les solutions stationnaires peut se mettre sous la forme :

$$\hbar\omega\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(x) + V(x)\varphi(x) \tag{1.8}$$

La forme de la solution stationnaire dépend évidemment de la valeur de l'énergie E relativement au potentiel V_0. Nous considérons donc plusieurs cas :

A) Cas où $E > V_0$: réflexion partielle

$$\varphi_I(x) = Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} \tag{1.9}$$

avec

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \tag{1.10}$$

dans la région II, $x > 0$ et la fonction d'onde prend la forme :

$$\varphi_{II}(x) = Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x} \tag{1.11}$$

avec

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) \tag{1.12}$$

si l'on considère que la particule n'est plus réfléchie après le passage de la barrière ($B' = 0$), nous pouvons écrire les conditions de raccordement en $x = 0$ (continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée), ou les équations (1.9) et (1.11) deviennent :

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \qquad \text{,soit} \qquad A + A\prime = B \tag{1.13}$$

$$\frac{d\varphi_I(0)}{dx} = \frac{d\varphi_{II}(0)}{dx}, \qquad \text{soit} \quad k_1A - k_1A' = k_2B \tag{1.14}$$

Les équations (1.13) et (1.14) nous permettent de calculer les rapports :

$$\frac{A'}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{et} \; \frac{B}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \tag{1.15}$$

En reprenant les expressions des coefficients de réflexion et de transmission à l'interface, nous obtenons pour la marche de potentiel en tenant compte des équations (1.15) :

$$R = \left|\frac{A'}{A}\right|^2 = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2 \tag{1.16}$$

$$T = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \tag{1.17}$$

On vérifie bien que $R + T = 1$.

Remarque :

- La particule est bien : soit réfléchie, soit transmise, mais on s'aperçoit que, à l'inverse des prévisions de la mécanique classique, il existe une probabilité non nulle qu'elle soit réfléchie bien que son énergie soit supérieure à la marche.

-Aucun déphasage (retard) n'est introduit ni à la réflexion, ni à la transmission, comme le montre l'équation (1.16) (rapports d'amplitudes réels)

-Si E est très grand devant $V_0, k_1 \approx k_2$ on trouve $T \approx 1$.

B) Cas ou $E > V_0$: réflexion totale Reprenons les équations (1.10) et (1.12) comme cette fois $V_0 > E > 0$, on peut écrire $k_2 = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} = i\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$, et l'équation (1.11) devient :

$$\varphi_{II}(x) = Be^{-p_2x} + B'e^{p_2x} \tag{1.18}$$

avec

$$p^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) > 0 \tag{1.19}$$

pour que la fonction reste bornée. Il convient que $B' = 0$ puisque $x > 0$ dans cette région la condition de raccordement l'équation (1.13) ne change pas et l'équation (1.14) devient alors :

$$ik_1A - ik_1A' = -p_2B \tag{1.20}$$

et la combinaison des équations(1.20) et (1.15) nous donne les nouveaux rapports d'amplitudes :

$$\frac{A'}{A} = \frac{k_1 - ip_2}{k_1 + ip_2} \quad \text{et} \quad \frac{B}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + ip_2} \tag{1.21}$$

ce qui conduit au facteur de réflexion :

$$\left|\frac{A'}{A}\right|^2 = \left|\frac{k_1 - ip_2}{k_1 + ip_2}\right|^2 = 1 \tag{1.22}$$

Interprétation :

Comme en mécanique classique, la particule est réfléchie totalement. Cependant, il existe maintenant une fonction d'onde, onde évanescente, qui implique une probabilité non nulle de trouver la particule dans la région II qui est interdite en physique classique. Cette probabilité décroît exponentiellement avec x.

Remarque :

Le rapport de A' sur A étant complexe implique que l'onde réfléchie est déphasée par rapport à l'onde incidente. Ceci s'explique par le retard que prend la particule en pénétrant dans la région II.

1.1.1.-1-Résolution de l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques :

Pour écrire l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques il faut faire une transformation en coordonnées sphériques à partir des coordonnées cartésiennes. Nous avons utilisé la conversion $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, de plus, les variables (x, y, z) en coordonnées cartésiennes pourraient être liées aux variables (r, θ, ϕ) en coordonnées sphériques comme suit ;

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\phi \\ y = r\sin\theta\sin\phi \\ z = r\cos\theta \\ \theta = \cos^{-1}(\frac{z}{r}) \\ \phi = \tan^{-1}(\frac{y}{x}) \end{cases} \tag{1.23}$$

Avec : $r \geq 0$, $0 \leq \theta \leq \pi$ et $0 \leq \phi \leq 2\pi$.

Maintenant, nous mettons les variables séparables en coordonnées sphériques dans l'équation (1.1), nous utiliserons la relation de ∇^2 en coordonnées sphériques au fur et à mesure que nous développons l'équation de Schrödinger dans la même coordonnée. Ainsi, elle peut être écrite comme :

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}) + V(r)]\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi) \tag{1.24}$$

où le ∇^2 est donné en coordonnées sphériques :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{1.25}$$

La résolution de l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques consiste dans le choix d'un potentiel central $V(r)$ et la recherche d'une solution séparable :

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi) \tag{1.26}$$

où $R(r)$ représente la fonction radiale inconnue et $Y(\theta,\varphi)$la fonction angulaire (une harmonique sphérique).

En utilisant la forme supposée de$\psi(r,\theta,\phi)$, nous pouvons écrire l'équation de Schrödinger comme :

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR(r)}{dr}) + \frac{2m}{\hbar^2}r^2(E-V(r)) = \frac{1}{Y(\theta,\phi)}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y(\theta,\phi)}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right] \tag{1.27}$$

Les deux membres de cette équation dépendent de variables différentes et indépendantes, ils ne peuvent donc être égaux si et seulement si ils sont égaux à une constante L. Par conséquent, les deux équations suivantes doivent être vraies simultanément :

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR(r)}{dr}) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r) - \frac{L}{r^2}\right]R(r) = 0, \tag{1.28}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y(\theta,\phi)}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y(\theta,\phi)}{\partial\phi^2} + LY(\theta,\phi) = 0, \tag{1.29}$$

Maintenant, nous avons deux équations différentes et nous pouvons traiter chacune séparément parce que les variables radiales entrent dans l'équation (1.28) et seules les variables angulaires dans l'équation (1.29). La solution de la partie angulaire donnée dans l'équation (1.29) est simple car cette partie n'a ni potentiel ni terme énergétique et nous pouvons donc essayer à nouveau la méthode de séparation des variables, en supposant la fonction angulaire sous la forme $Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$. En insérant $Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$, il convient de noter que l'équation (1.29)est séparable, $\Theta(\theta)$ et $\Phi(\phi)$ satisfont alors aux équations différentielles suivantes :

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}) + (L - \frac{m^2}{\sin^2\theta})\Theta(\theta) = 0, \tag{1.30}$$

$$\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} = -\mu^2 \tag{1.31}$$

Nous savons certainement que l'on peut résoudre ces équations facilement. Par conséquent, nous ne donnerons pas de solutions générales de ces équations, mais nous allons juste mentionner leurs résultats qui sont liés aux nombres quantiques orbital L et azimutal μ, et discuter leurs significations physiques. Sur la base de la solution physiquement acceptable de l'équation qui dépend de la variable ϕ, on peut dire que la constante séparable μ doit être nombre entier relatif, c'est-à-dire, $\mu = 0, \pm1, \pm2, ...$La constante μ est également connue comme le nombre quantique magnétique. Si nous revenons à l'équation plus difficile qui dépend de la variable θ, nous pouvons réécrire l'équation (1.32) par un changement de variables $\omega = \cos\theta$. L'équation avec la fonction $\Theta(\theta)$devient :

$$\frac{d}{d\omega}\left[(1-\omega^2)\frac{dP(\omega)}{d\omega}\right] + (L - \frac{\mu^2}{1-\omega^2})P(\omega) = 0, \tag{1.32}$$

où $P(\omega)$ est le polynôme de Legendre.

En général, l'équation (1.32) a deux solutions indépendantes qui deviennent finies pour $\omega = \pm1$.

Cependant, les fonctions d'onde qui satisfont aux conditions aux limites dans l'équation (1.32) sont finies et à valeurs uniques partout spatialement parceque nous étudions la solution à états liés de l'équation de Schrödinger, si la constante L est de la forme:

$$L = \ell\ (\ell + 1), \tag{1.33}$$

avec ℓ est introduit comme le nombre quantique orbital et les valeurs de ℓ sont égales à ;

$$\ell = 0,\ 1,\ 2,\ 3... \tag{1.34}$$

Pour ces valeurs de ℓ, l'une des solutions peut être finie pour toutes les valeurs de ω. Dans la définition de la fonction de Legendre associée, la grandeur du nombre quantique magnétique μ doit être limité à des valeurs inférieures ou égales à ℓ car les polynômes de Legendre sont des polynômes d'ordre ℓ ;

$$|\mu| = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ .... \leq \ell \tag{1.35}$$

D'un autre côté, il existe $(2\ell + 1)$ de valeurs autorisées pour μ, c'est-à-dire, $-\ell \leq \mu \leq \ell$. La substitution $L = \ell\ (\ell + 1)$ dans l'équation (1.28) montre que la fonction d'onde radiale

$R(r)$ et la valeur propre E de l'équation de Schrödinger qui dépend du nombre quantique ℓ et satisfait à l'équation :

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(r) - \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}\right]R(r) = 0 \qquad (1.36)$$

Cette Equation peut être représentée comme une équation différentielle ordinaire à coefficients variables et peut être résolue par les méthodes standards qui ont déjà été données dans les manuels de mécanique quantique [11][12] . Cependant, la solution analytique de l'équation (1.36) dépend de la fonction potentielle $V(r)$.

1.1.2 L'équation de Schrödinger généralisée $m = m(x)$

1.1.2.I- L'hamiltonien généralisé :

Beaucoup de recherches ont abordé le sujet de l'hamiltonien effectif généralisé à des systèmes à masses effectives dépendant de la position. Ces recherches ont des conséquences directes dans différents domaines (physique nucléaire, physique de la matière condensée, physique des semi-conducteurs ...). À cause de cette importance, nous allons dans ce qui suit, présenter, collecter et résumer les articles principaux qui traitent des systèmes quantiques à masses dépendant de la position.

Revue historique

D.J.Ben Daniel et C.B.Duke (1966) : Dans cet article[13], le modèle de Bethe-Sommerfeld pour l'effet tunnel d'un électron est pris comme cadre pour l'étude de la pénétration à travers une barrière. En particulier ils ont étudié le cas où la courbure (la masse de l'électron) et le centre des surfaces d'énergie constante d'un électron varient à travers la jonction. En conclusion, ces auteurs préconisent la forme adéquate suivante de l'hamiltonien :

$H_{BDD} = \frac{1}{2}P[m(x)]^{-1}P$

le choix de Ben Daniel ($\alpha = \gamma = 0, \beta = 1$)

Thaddeus Gora et Ferd Williams (1969) : Dans cet article [14], Thaddeus Gora et Ferd Williams ont étudié des semi-conducteurs lentement gradués dont les masses effectives dépendent de la position, décrits en termes d'un hamiltonien effectif. Ce dernier est pris sous la forme hermitique :

$$H_{GW} = (p^2m(x)]^{-1} + m(x)]^{-1}p^2)$$

Les semi-conducteurs qui ont une gradation lente dans leur composition présentent des bandes d'énergies et des masses effectives qui dépendant de la position, et qui globalement sont décrits par un hamiltonien effectif à travers une équation à masse effective. Le problème des phénomènes de transport des porteurs de charge minoritaires pour des systèmes gradués sont gouvernés par un champ effectif qui inclut le champ électrostatique plus un terme en fonction du gradient de la pente de la bande, et un autre terme qui dépend du gradient de la masse effective. La durée de vie de la recombinaison locale radiative ainsi que la densité locale des états des semi-conducteurs inhomogènes y sont discutés. L'équation pour l'excès de la concentration des porteurs de charge minoritaires dans un semi-conducteur inhomogène y est déduite et diffère de celle d'un système homogène par le fait que : le champ effectif est remplacé par le champ électrique, la dépendance spatiale de la durée de vie et de la mobilité, et aussi par le terme dépendant du gradient de la mobilité des charges.

Hamiltonien de von Roos (1983) : Dans cet article [15], von Roos a considéré que le

mouvement des porteurs libres (électrons et trous) dans les semi-conducteurs d'une composition chimique non uniforme est parfois décrit par un hamiltonian possédant une masse effective dépendant de la position. Dans des travaux antérieurs, il a montré que les masses dépendant de la position conduisent à des incohérences en raison du théorème de Bargmann, qui postule que la superposition cohérente d'états de masses différentes (paquets d'ondes) est interdite. Il propose une extension du théorème de Bargmann mais qui mène à un hamiltonien avec masses dépendant de la position ne vérifiant plus l'invariance galiléenne. Il montre aussi que la dérivation usuelle de l'hamiltonian avec masse effective dépendant de la position est nullement unique. Il existe en général, beaucoup d'hamiltonians inégaux issus de la même approximation, tous dérivés de beaucoup de forme d 'hamiltonians de base. Le théorème de Wannier-Slater valide pour les semi-conducteurs homogènes avec une composition chimique uniforme peut s'avérer être un point de départ normal pour une extension et une généralisation aux matériaux non uniformes, il suppose une masse scalaire dépendante de la position $m(r)$ et propose la forme suivante de l'opérateur énergie cinétique :

$$T = -\hbar^2/4(m(z)^{\alpha}\nabla m(z)^{\beta}\nabla m(z)^{\gamma} + m(z)^{\gamma}\nabla m(z)^{\beta}\nabla m(z)^{\alpha}) \tag{1.37}$$

avec : $\alpha + \beta + \gamma = -1$

L'opérateur de Gora et William est obtenu pour $\alpha = -1$et $\beta = \gamma = 0$, alors que celui de Zhu et Kroemer pour $\alpha = \gamma = -1/2$ et $\beta = 0$. Pour le cas $\alpha = \gamma = 0$ et $\beta = -1$ on abouti à

un troisième opérateur très usité.

Contribution de Jean-Marc Lévy-Leblond (1995): Jean-Marc Lévy-Leblond dans l'article [16], a appliqué la notion d'invariance galiléenne instantanée pour montrer que l'idée de la masse effective dépendant de la position est consistante et utile. L'invariance galiléenne instantanée est employée pour dériver à partir des principes premiers de la formulation hamiltonienne, l'expression de l'opérateur énergie cinétique d'un électron ayant une masse efficace dépendante de la position. Et par conséquent les conditions de raccordement de la fonction d'onde à travers des hétérojonctions abruptes.

L'étude d'hétérostructures de semi-conducteurs (et, plus généralement, de cristaux non homogènes) a donné lieu, dernièrement, à une discussion approfondie sur l'utilisation de modèles avec masse effectives simples (liées aux approximations de la fonction enveloppe) pour la dynamique des électrons dans de tels systèmes. Les principales conclusions de son étude sont :

a) Les conditions de continuité normales sur les interfaces abruptes, à savoir la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée doivent être remplacées par la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée divisée par la fonction masse $m(x)$.

b) Comment généraliser la forme de l'opérateur cinétique afin de le rendre hermitique pour le cas d'une masse dépendante de la position, sachant que l'opérateur masse m ne commute plus avec l'opérateur impulsion p.

c) L'application du concept PDM, en tant qu'idée dans la théorie quantique non relativiste est intimement liée à la notion d'invariance galiléenne dans la théorie de la particule libre, qui ne permet pas l'utilisation d'une masse effective non constante dans la structure d'un cristal non homogène.Se basant sur la notion d'invariance galiléenne il a abouti à la conclusion que :

1− Les conditions de raccordement aux interfaces doivent être la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée divisée par la masse.

2− L'opérateur énergie cinétique correct doit être sous la forme: $T = P\ [1/2m(x)]P$

3− L'idée de l'utilisation d'une masse dépendante de la position est non seulement intéressante mais elle est aussi consistante.

Apport de L.Dekar et L.Chetouani et T.F.Hammam(1995): Dans cet article [17] sous le titre : "Green's functions via path integrals for systems with position-dependent masses", les auteurs on étudié des systèmes à potentiels et à masses constantes par morceaux.

Ils ont utilisé le formalisme des intégrales de parcours pour relier, la fonction de Green de systèmes à potentiels et à masses constantes par morceaux à celle à masse constante. L'application de ce résultat aux cas d'une marche abrupte et d'une barrière rectangulaire en potentiel et en masse, leurs a permis d'une part, d'extraire de la discontinuité de la fonction de Green, la fonction d'onde, et d'autre part les conditions de continuité à travers la jonction [18].

Apport de L.Dekar et L.Chetouani et T.F.Hammann (1999) : Dans leurs article sous le titre : " Wave function for smooth potential and mass step " [19], il ont proposé la solution de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle, pour l 'hamiltonien effective généralisé

$$H_{gen} = -1/4(m^{\alpha}Pm^{\beta}Pm^{\gamma} + m^{\gamma}Pm^{\beta}Pm^{\alpha}) + V \qquad \text{,où } \alpha+\beta+\gamma = -1 \qquad (1.38)$$

Pour des systèmes à marches douces en potentiel et en masse, la fonction d'onde dépend de la fonction de Heun. En étudiant le passage à la limite où les marches douces tendent vers des marches abruptes ils arrivent à la conclusion que les paramètres d'ambiguïté doivent prendre les valeurs $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = -1$, ce qui suggère que la forme appropriée pour l'hamiltonien pour une masse effective abrupte devrait avoir la forme $H_{abrupt} = 1/2(Pm^{-1}P) + V$. Cette forme implique que les conditions de raccordement à travers une interface abrupte doivent être la continuité de $\psi(x)$ et de $[m(x)^{-1}]d(\psi(x))/dx$.

Dutra et Almeida (2000) : Dans l'article [20] dénommé "Exact solvability of potentials with spatially dependent effective masses", Dutra et Almeida ont effectué un essai de fiabilité sur l'ordre des paramètres disponibles dans la littérature. Ils ont employé un modèle exactement solvable (potentiel de Morse) et ont conclu que l'ordre de Gora et de Williams ($a = \beta = \gamma = 0$, $\alpha = -1$) et Ben Daniel et Duke ($a = \alpha = \gamma = 0, \beta = -1$) devrait être rejetés pour le fait qu'ils mènent à des énergies complexes et donc non physiques. Cependant, ils ont classifié l'ordre de Zhu et de Kroemer($a = 0, \alpha = \gamma = -1/2, , \beta = 0$), et celui de Li et de Kuhn ($a = \alpha = 0, \beta = \gamma = -1/2$)comme étant corrects. En conséquence, ils suggèrent que lesconditions de continuité aux frontières de l'hétérojonction obtenues par Zhu et Kroemer sont les plus fiables.

Apport de Mustafa et Mazharimousavi (2007) : Dans leur article titré "Ordering Ambiguity Revisited via Position Dependent Mass Pseudo-Momentum Operators" , les auteurs [21] ont utilisé la notion d'opérateur pseudo-moment pour aboutir à la conclusion que le " bon ordre fiable " est le choix ($\beta = -1/2, \alpha = \gamma = -1/4$).

1.1.2.II -L'équation de Schrödinger généralisée m=m(x)

L'équation de Schrödinger avec une masse variable est un modèle intéressant d'un point de vue théorique et très utile pour la description de beaucoup de phénomènes physiques. Son utilisation la plus répandue est dans le domaine de la physique des nanostructures de semi-conducteurs. L'intérêt croissant porté à ce domaine est dû au développement impressionnant des technologies sophistiquées de croissance de semiconducteur, comme l'épitaxie par jet moléculaire. Le mouvement des électrons dans les semiconducteurs est souvent décrit par l'équation de Schrödinger avec une masse dépendent de la position[22].

1.1.2.II-1- Présentation de l'équation de Schrödinger généralisée : l'hamiltonien effectif généralisé avec une masse variable est écrit sous la forme :

$$H_{gen} = -\frac{1}{4}(m(x)^{\alpha} P m(x)^{\beta} P m(x)^{\gamma} + m(x)^{\gamma} P m(x)^{\beta} P m(x)^{\alpha}) + V(x), \qquad \text{où } \alpha+\beta+\gamma = -1 \tag{1.39}$$

et l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$H\psi(x) = E\psi(x) \tag{1.40}$$

L'opérateur d'impulsion $\hat{p}$ définit comme $i\hbar\overrightarrow{\nabla}$, donc $\hat{p}_x = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

Lorsqu'on remplace les expressions de H_{gen} et $\hat{p}_x$ dans l'équation de Schrödinger, on obtient :

$$-\frac{\hbar^2}{4}m^{\alpha}(x)\frac{d}{dx}\{m^{\beta}(x)\frac{d}{dx}[m^{\gamma}(x)\psi(x)]\} - \frac{\hbar^2}{4}m^{\gamma}(x)\frac{d}{dx}[m^{\beta}(x)\frac{d}{dx}[m^{\alpha}(x)\psi(x)]\} + [V(x)-E]\psi(x) = 0 \tag{1.41}$$

$$-\frac{\hbar^2}{4}m^{\alpha}(x)\frac{d}{dx}\{m^{\beta}(x)[\gamma m^{\gamma-1}(x)m'(x)\psi(x)+m^{\gamma}(x)\frac{d\psi(x)}{dx}]\}- \\ \frac{\hbar^2}{4}m^{\gamma}(x)\frac{d}{dx}\{m^{\beta}(x)[\alpha m^{\alpha-1}(x)m'(x)\psi(x)+m^{\alpha}(x)\frac{d\psi(x)}{dx}]\}+[V(x)-E]\psi(x)=0 \tag{1.42}$$

Donc :

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{4}m^{\alpha}(x)\frac{d}{dx}\{[\gamma m^{\beta+\gamma-1}(x)m'(x)\psi(x)+m^{\beta+\gamma}(x)\frac{d\psi(x)}{dx}]\}- \\ \frac{\hbar^2}{4}m^{\gamma}(x)\frac{d}{dx}\{[\alpha m^{\beta+\alpha-1}(x)m'(x)\psi(x)+m^{\beta+\alpha}(x)\frac{d\psi(x)}{dx}]\}+[V(x)-E]\psi(x)=0 \tag{1.43}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{4}m^{\alpha}(x)\{(\gamma(\beta+\gamma-1)m^{\beta+\gamma-2}(x)m'^2(x)\psi(x))+\gamma m^{\beta+\gamma-1}(x)m''(x)\psi(x))+ \\ \gamma m^{\beta+\gamma-1}(x)m'(x)\frac{d\psi(x)}{dx})+((\beta+\gamma)m^{\beta+\gamma-1}(x)m'(x)\frac{d\psi(x)}{dx})+(m^{\beta+\gamma}(x)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2})\}- \\ \frac{\hbar^2}{4}m^{\gamma}(x)\{(\alpha(\beta+\alpha-1)m^{\beta+\alpha-2}(x)m'^2(x)\psi(x)+(\alpha m^{\beta+\alpha-1}(x)m''(x)\psi(x))+ \\ \alpha m^{\beta+\alpha-1}(x)m'(x)\frac{d\psi(x)}{dx}+((\beta+\alpha)m^{\beta+\alpha-1}(x)m'(x)\frac{d\psi(x)}{dx})+(m^{\beta+\alpha}(x)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2})\} \\ +[V(x)-E]\psi(x)=0 \tag{1.44}$$

On peut réécrire l'équation précédente comme suit :

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{4}\{\gamma(\beta+\gamma-1)\frac{m'^2(x)}{m^3(x)}\psi(x)+\gamma\frac{m''(x)}{m^2(x)}\psi(x)+\gamma\frac{m'(x)}{m^2(x)}\frac{d\psi(x)}{dx}+(\beta+\gamma)\frac{m'(x)}{m^2(x)}+ \\ \frac{1}{m(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\alpha(\beta+\alpha-1)\frac{m'^2(x)}{m^3(x)}\psi(x)+\alpha\frac{m''(x)}{m^2(x)}\psi(x)+\alpha\frac{m'(x)}{m^2(x)}\frac{d\psi(x)}{dx}+ \\ (\beta+\alpha)\frac{m'(x)}{m^2(x)}\frac{d\psi(x)}{dx}+\frac{1}{m(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\}+[V(x)-E]\psi(x)=0 \tag{1.45}$$

Donc l'équation de Schrödinger généralisée s'écrit sous la forme :

$$[-\frac{1}{2m(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{m'(x)}{2m^2(x)}\frac{d\psi(x)}{dx}+(V(x)-E)\psi(x)]+ \\ ((1+\beta)m(x)m''(x)-(2\beta+1+\alpha(\alpha+\beta+1)+m'^2(x)).\frac{\psi(x)}{4m^3(x)}=0 \tag{1.46}$$

1.1.2.II-2-Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour un potentiel rectangulaire et en masse [22] :

Maintenant, on va considérer le problème de la transmission d'une particule à travers une barrière de potentiel rectangulaire et en masse :

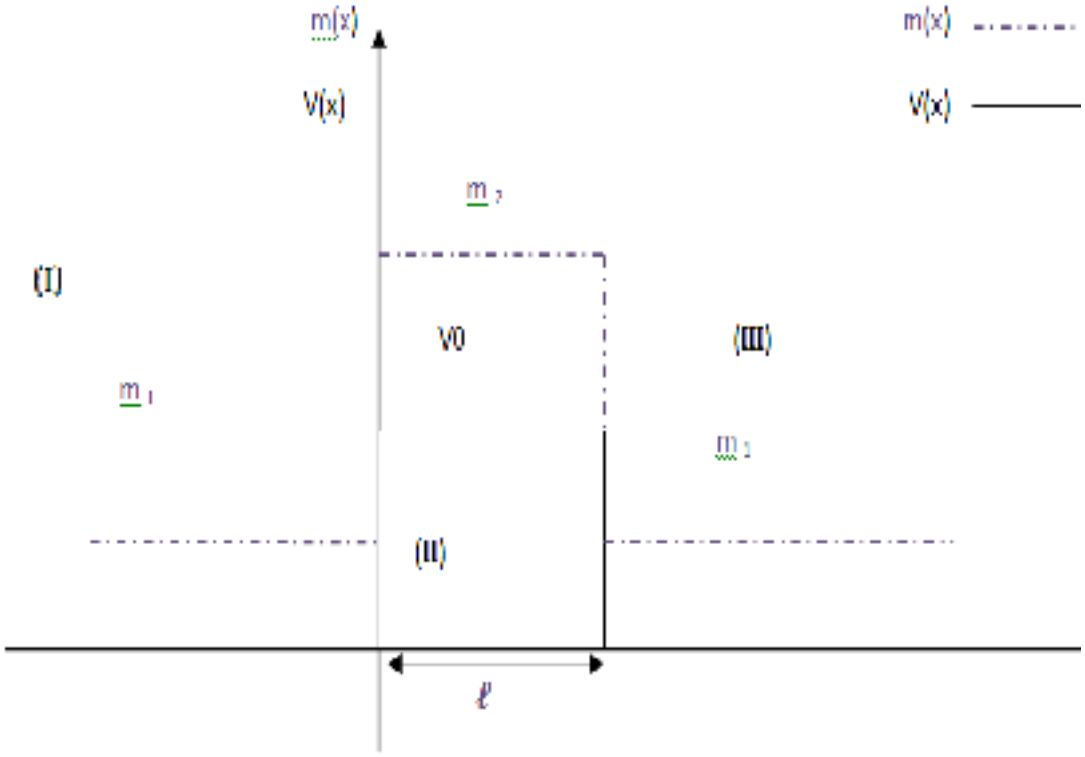


Figure-2-

Considérons une particule dans une barrière de potentiel $V(x)$ et une masse $m(x)$ rectangulaires.

où :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad x < 0\ , \ \text{Région}I \\ V_0 & \text{si} \quad 0 < x < \ell\ , \ \text{Région}II \\ 0 & \text{si} \quad x > \ell\ , \ \text{Région}\ III \end{cases}$$

et

$$m(x) = \begin{cases} m_1 & \text{si} \quad x < 0\ , \ \text{Région}I \\ m_2 & \text{si} \quad 0 < x < \ell\ , \ \text{Région}II \\ m_1 & \text{si} \quad x > \ell\ , \ \text{Région}\ III \end{cases}$$

L'hamiltonien du système avec une masse dépendante de la position :

$$H_{gen} = -\frac{1}{4}(m(x)^{\alpha} P m(x)^{\beta} P m(x)^{\gamma} + m(x)^{\gamma} P m(x)^{\beta} P m(x)^{\alpha}) + V(x), \tag{1.47}$$

avec la contrainte $\alpha + \beta + \gamma = -1$.

L'équation aux valeurs propres de l'énergie s'écrit $E\psi = H\psi$ soit :

$$\begin{gathered}[-\frac{1}{2m(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{m'(x)}{2m^2(x)}\frac{d\psi(x)}{dx}+(V(x)-E)\psi(x)]+\\((1+\beta)m(x)m''(x)-(2\beta+1+\alpha(\alpha+\beta+1)+m'^2(x)).\frac{\psi(x)}{4m^3(x)}=0\end{gathered} \tag{1.48}$$

La résolution de l'équation de Schrödinger permet le calcul des fonctions d'onde dans chaque région de potentiel d'où l'on déduit le coefficient de transmission et de réflexion.

II-2-2-1-Solution dans la région (I) :

On s'intéresse au cas $\varepsilon > V_0$

L'équation de Schrödinger indépendante du temps peut-être écrite comme:

$H\psi(x) = \varepsilon\psi(x)$, l'équation aux valeurs propres dans la région$I$ est :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} = \varepsilon\psi_I(x) \tag{1.49}$$

avec : $k_1^2 = \frac{2m_1\varepsilon}{\hbar^2}$

La solution dans la région (I) prend la forme :

$$\psi_I\ (x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \tag{1.50}$$

II-2-2-2-Solution dans la région (II) :

Dans la région II :

$$\frac{d^2\psi_{II}\ (x)}{dx^2} + \frac{2m_2}{\hbar^2}(\varepsilon - V_0)\psi_{II}(x) = 0 \tag{1.51}$$

Avec : $k_2^2 = \frac{2m_1(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}$

La solution dans la région (II) s'écrit :

$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x} \tag{1.52}$$

II-2-2-3-Solution dans la région (III) :

L'équation aux valeurs propres dans la région (III) s'écrit :

$$\frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} + \frac{2m_1}{\hbar^2}\varepsilon\psi_{III}(x) = 0 \tag{1.53}$$

Avec : $k_1^2 = \frac{2m_1\varepsilon}{\hbar^2}$

Donc la solution dans la région (III) de la fonction d'onde indépendante du temps prend la forme :

$$\psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \tag{1.54}$$

Prenons $A'_3 = 0$(particule incidente venant de $x = -\infty$), donc :

$$\psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1 x} \tag{1.55}$$

II-2-2-4-Conditions de continuité :

Selon le choix de Lévy-Leblond la fonction d'onde Ψ est continue et la dérivée de la fonction d'onde sur la masse $\frac{\psi'}{m}$est continue, Nous devons assurer la continuité de la fonction d'onde et de celle de sa dérivée.

II-2-2-4-a-Raccord des régions (I) et (II) :

Les conditions de continuité en $x = 0$

- La continuité de la fonction en $x = 0$ est :

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2 \tag{1.56}$$

-La continuité de la dérivée de la fonction en $x = 0$ sur la masse est :

$$\frac{1}{m_1}\psi'_I(0) = \frac{1}{m_2}\psi'_{II}(0) \Rightarrow \frac{k_1}{m_1}(A_1 - A'_1) = \frac{k_2}{m_2}(A_2 - A'_2) \tag{1.57}$$

Posons que :

$$v_1 = \frac{k_1}{m_1} \tag{1.58}$$

Les conditions de continuité conduisent au système

$$A_1 + A'_1 = A_2 - A'_2 \tag{1.59}$$

$$A_1 - A'_1 = \frac{v_2}{v_1}(A_2 - A'_2) \tag{1.60}$$

II-2-2-4-b-Raccord région (II) et (III):

- La continuité de la fonction d'onde en $x = \ell$:

$$\psi_{II}(\ell) = \psi_{III}(\ell) \Rightarrow A_2 e^{ik_2\ell} + A'_2 e^{-ik_2\ell} \tag{1.61}$$

- La continuité de la dérivée de fonction sur la masse en $x = \ell$:

$$\frac{1}{m_2}\psi'_{II}(\ell) = \frac{1}{m_1}\psi'_{III}(\ell) \Rightarrow (A_2 e^{ik_2 x} - A'_2 e^{-ik_2 x}) = A_3 \frac{v_1}{v_2} e^{ik_1\ell} \tag{1.62}$$

Donc :

$$\begin{cases} A_2 e^{ik_2\ell} + A'_2 e^{-ik_2\ell} = A_3 e^{ik_1\ell} \\ A_2 e^{ik_2\ell} - A'_2 e^{-ik_2\ell} = \frac{v_1}{v_2} A_3 e^{ik_1\ell} \end{cases} \tag{1.63}$$

En utilisant les équations (1.59) et (1.60), on obtient :

$$\Rightarrow \begin{cases} A_1 = (\frac{v_1+v_2}{2v_1})A_2 + (\frac{v_1-v_2}{2v_1})A'_2 \\ A'_1 = (\frac{v_1+v_2}{2v_1})A_2 + (\frac{v_1-v_2}{2v_1})A'_2 \end{cases} \tag{1.64}$$

Nous avons le système d'équations en utilisant (1.63)

$$\Rightarrow \begin{cases} A_2 = (\frac{v2+v1)}{2v2})e^{i(k_1-k_2)\ell} A_3 \\ A'_2 = (\frac{v2-v1}{2v2})e^{i(k_1+k_2)\ell} A_3 \end{cases} \tag{1.65}$$

On remplaçant l'équation (1.65) dans la $1^{ére}$ équation (1.64), on obtient :

$$A_1 = (\frac{v_1+v_2}{2v_1})(\frac{v2+v1)}{2v2})e^{i(k_1-k_2)\ell} A_3 + (\frac{v_1-v_2}{2v_1})(\frac{v2-v1}{2v2})e^{i(k_1+k_2)\ell} A_3 \tag{1.66}$$

Donc :

$$A_3 = \frac{4v_1 v_2 e^{-ik_1\ell}}{(v_1+v_2)^2 e^{-ik_2\ell} - (v_1-v_2)^2 e^{ik_2\ell}} A_1 \tag{1.67}$$

II-2-2-4-5-Coefficients de transmission et de réflexion :

On introduit le coefficient de transmission T de la barrière

avec $T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2$, car : nous avons le même vecteur d'onde dans les régions (I) et (III).

Ce qui donne :

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \left|\frac{4v_1 v_2 e^{-ik_1\ell}}{(v_1+v_2)^2 e^{-ik_2\ell} - (v_1-v_2)^2 e^{ik_2\ell}}\right|^2 \tag{1.68}$$

Si $\varepsilon < V_0$ on a $k_2 = \pm i\tilde{k}_2$

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \left|\frac{4v_1v_2e^{-ik_1\ell}}{(v_1+v_2)^2e^{-i\tilde{k}_2\ell} - (v_1-v_2)^2e^{i\tilde{k}_2\ell}}\right|^2 \tag{1.69}$$

Si $\varepsilon > V_0$

$$T = \frac{(4v_1v_2)^2}{((v_1+v_2)^2e^{-ik_2\ell} - (v_1-v_2)^2e^{ik_2\ell})((v_1+v_2)^2e^{-ik_2\ell} - (v_1-v_2)^2e^{ik_2\ell})} \tag{1.70}$$

Après la simplification nous obtenons le coefficient suivant :

$$T = \frac{(4_1v_2)^2}{(v_1+v_2)^4 + (v_1-v_2)^4 - 2(v_1+v_2)^2 - (v_1-v_2)^2\cos(2k_2\ell)} \tag{1.71}$$

Que l'on peut aussi sous la forme :

$$T = \frac{4(v_1v_2)^2}{4(v_1v_2)^2 + (v_1^2-v_2^2)^2\sin^2(k_2\ell)} \tag{1.72}$$

à la fin obtient :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(v_1^2-v_2^2)^2}{4(v_1v_2)^2}\sin^2(k_2\ell)} \tag{1.73}$$

et le coefficient de réflexion de la barrière s'écrit sous la forme :

$$R = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^{\ 2} = \left|\frac{(v_1+v_2)(v_2-v_1)(e^{-ik_2\ell} - e^{-ik_2\ell})}{(v_2^2+v_1^2+2v_1v_2)e^{-ik_2\ell} - (v_2^2+v_1^2-2v_1v_2)e^{ik_2\ell}}\right| \tag{1.74}$$

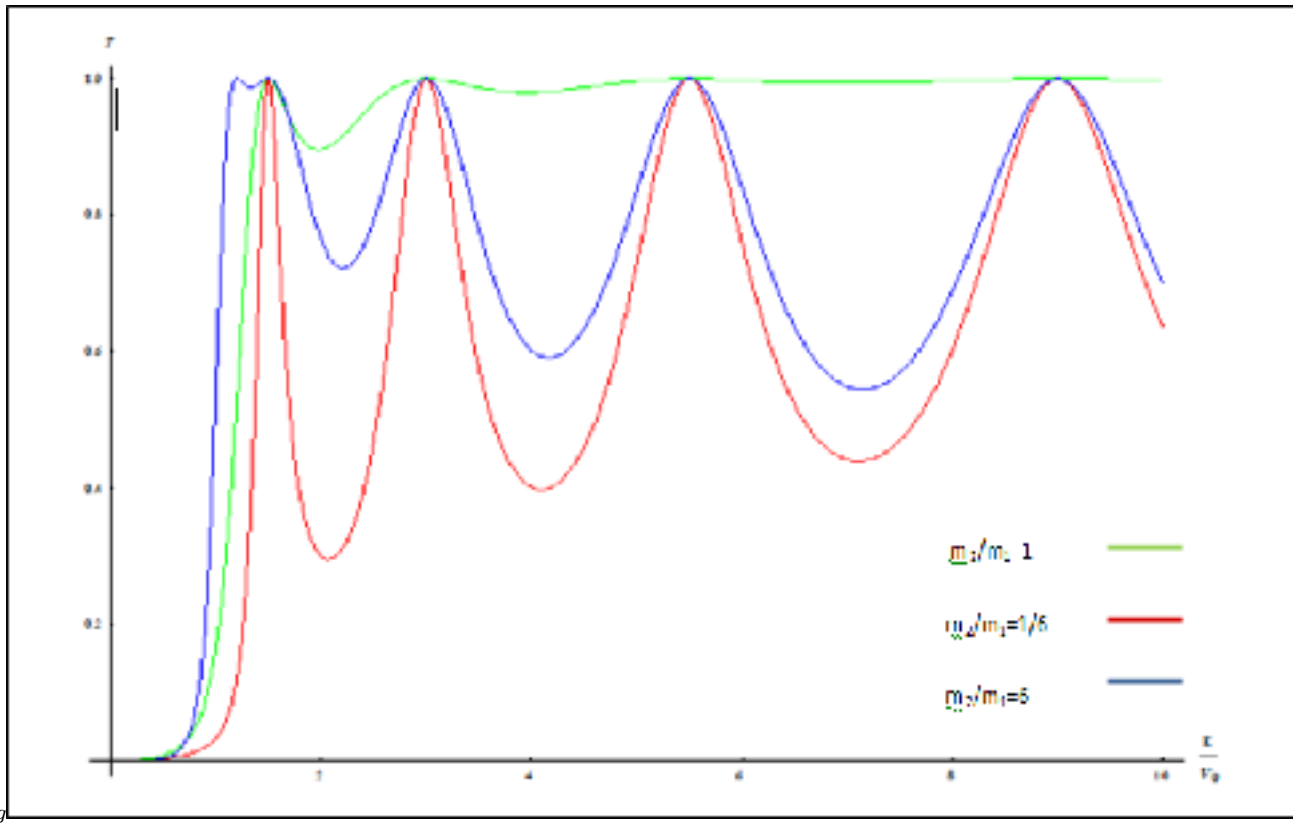
Que l'on peut réécrire également sous la forme :

$$R = \frac{(v_1^2-v_2^2)^2\sin^2(k_2\ell)}{(v_2^2-v_1^2)\sin^2(k_2\ell) + 4(v_2v_1)^2} \tag{1.75}$$

II-2-2-4-6- La courbe des coefficients de transmission pour une barrière du potentiel

et une masse rectangulaires :

3



4.*png*

Figure -3- : Variation du coefficient de transmission à travers une barrière de potentiel et en masse

On observe trois graphes du coefficient de transmission en fonction de l'énergie qui présente :

- Pour $\frac{m_2}{m_1} = 1$

le coefficient de transmission T subit des oscillations "amorties" très rapides et légèrement en fonction de E est s'approche asymptotiquement de la valeur 1, lorsque $E > V_0$.

-Pour $\frac{m_2}{m_1} = \frac{1}{6}$

Le coefficient de transmission oscille d'une manière périodique entre la valeur minimale $T_1 = \frac{4\sqrt{m_1}\sqrt{m_2}}{(\sqrt{m_1}+\sqrt{m_2})}$ et l'unité avec $E > V_0$. La fonction ainsi obtenue est l'analogue de celle qui décrit la transmission d'un interféromètre de Fabry -Pèrot; comme en optique.

-Pour $\frac{m_2}{m_1} = 6$

Le coefficient de transmission oscille lentement entre la valeur minimale $T_1 = \frac{4\sqrt{m_1}\sqrt{m_2}}{(\sqrt{m_1}+\sqrt{m_2})}$ et l'unité pour $E > V_0$. (qui diminue progressivement suite à l'augmentation de l'énergie).

II-2-2-5-Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour une double barrière rectangulaire en potentiel et en masse

On considère le problème de la transmission d'une particule à travers une double barrière en potentiel et en masse rectangulaire :

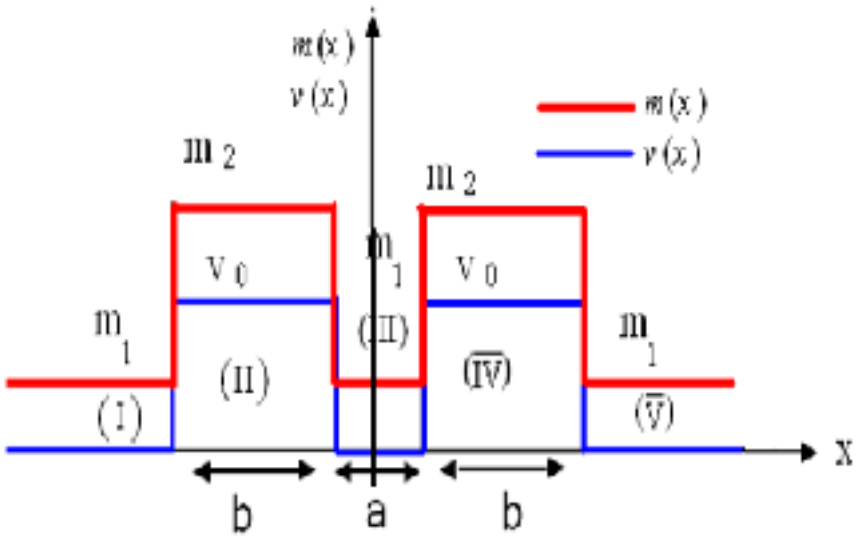


Figure 4 :

Le potentiel et la masse s'expriment en fonction des cinq régions I à V par :

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < d, x >, -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ V_0, & -(d-h) < x < -(\frac{a}{2}+h), (\frac{a}{2}+h) > x > (d-h) \\ \frac{V_0}{h}(x+d), & -d < x < -(d-h) \\ -\frac{V_0}{h}(x+\frac{a}{2}), & -(\frac{a}{2}+h) < x < -\frac{a}{2} \\ \frac{V_0}{h}(x-\frac{a}{2}), & \frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}+h \\ -\frac{V_0}{h}(x-d), & (d-h) < x < d \end{cases} \tag{1.76}$$

$$m(x) = \begin{cases} m_1, & -(\frac{a}{2}+h) < x < (\frac{a}{2}+h), x < -(d-h), x > (d-h) \\ m_2, & -(d-h) < x < -(h+\frac{a}{2}), (h+\frac{a}{2}) < x < (d-h) \end{cases} \tag{1.77}$$

II-2-2-5-1-Solution dans la région I :

Dans le cas où $\varepsilon > V_0$ l'équation de Schrödinger indépendante du temps peut-être écrite comme :

$H\psi(x) = \varepsilon\psi(x)$ et donc : $\psi''(x) + \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}\psi(x) = 0$

L'équation aux valeurs propres dans la région (I) s'écrit :

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + \frac{2m_1\varepsilon}{\hbar^2}\psi_I(x) = 0 \tag{1.78}$$

Sa solution dans la région (I) s'écrit:

$$\psi_I(x) = C_1 e^{ik_1 x} + C_1' e^{-ik_1 x} \tag{1.79}$$

II-2-2-5-2-Solution dans la région II :

Dans la région (II) :

$$\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m_2}{\hbar^2}(\varepsilon - V_0)\psi_{II}(x) = 0 \tag{1.80}$$

La solution dans la région (II) s'écrit :

$$\psi_{II}(x) = C_2 e^{ik_2 x} + C_2' e^{-ik_2 x} \tag{1.81}$$

II-2-2-5-3-Solution dans la région III :

L'équation aux valeurs propres dans la région (III) :

$$\frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} + \frac{2m_1\varepsilon}{\hbar^2}\psi_{III}(x) = 0 \tag{1.82}$$

La solution est de la forme:

$$\psi_{III}(x) = C_3 e^{ik_1 x} + C_3' e^{-ik_1 x} \tag{1.83}$$

II-2-2-5-4-Solution dans la région IV :

L'équation aux valeurs propres dans la région (IV)

$$\frac{d^2\psi_{IV}(x)}{dx^2} + \frac{2m_2}{\hbar^2}(\varepsilon - V_0)\psi_{IV}(x) = 0 \tag{1.84}$$

La solution dans la région (IV) s'écrit:

$$\psi_{IV}(x) = C_4 e^{ik_2 x} + C_4' e^{-ik_2 x} \tag{1.85}$$

II-2-2-5-5-Solution dans la région V :

L'équation aux valeurs propres dans la région (V)

$$\frac{d^2\psi_V(x)}{dx^2} + \frac{2m_1}{\hbar^2}\psi_V(x) = 0 \tag{1.86}$$

La solution est de la forme :

$$\psi_V(x) = C_5 e^{ik_1 x} + C_5' e^{-ik_1 x} \tag{1.87}$$

Prenons $C_5' = 0$(particule incidente venant $x = -\infty$)

Donc

$$\psi_V(x) = C_5 e^{ik_1 x} \tag{1.88}$$

II-2-2-5-6-Conditions de continuité :

les conditions de raccordement résultant du hamiltonien H sont la continuité de $m^\alpha\psi$ et de $m^\beta[d(m^\alpha\psi/dx]\psi$.

Nous devons assurer la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée.

II-2-2-5-6-a-Raccord des régions I et II :

Les conditions de continuité en $x = -(b + \frac{a}{2})$:

La continuité de la fonction :

$$\begin{aligned} m_2^\alpha \psi_{II}(-(b+\frac{a}{2})) &= m_1^\alpha \psi_I(-(b+\frac{a}{2})) \Rightarrow \\ m_2^\alpha (C_2 e^{ik_2(b+\frac{a}{2})} + C_2' e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})}) &= m_1^\alpha (C_1 e^{-ik_1(b+\frac{a}{2})} + C_1' e^{ik_1(b+\frac{a}{2})}) \end{aligned} \tag{1.89}$$

La continuité de la dérivée :

$$\begin{aligned} m_1^{\alpha+\beta}\psi_I'(-(b+\frac{a}{2})) &= m_2^{\alpha+\beta}\psi_{II}'(-(b+\frac{a}{2})) \Rightarrow \\ m_1^{\alpha+\beta}(ik_1)(C_1e^{-ik_1(b+\frac{a}{2})} - C_1'e^{ik_1(b+\frac{a}{2})}) &= m_2^{\alpha+\beta}(ik_2)(C_2e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})} - C_2'e^{ik_2(b+\frac{a}{2})}) \end{aligned} \tag{1.90}$$

Posons que $\eta = \frac{m_2}{m_1}$, Alors :

$$\begin{cases} C_1e^{-ik_1(b+\frac{a}{2})} - C_1'e^{ik_1(b+\frac{a}{2})} = \eta^{\alpha}(C_2e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})} + C_2'e^{ik_2(b+\frac{a}{2})}) \\ C_1e^{-ik_1(b+\frac{a}{2})} - C_1'e^{ik_1(b+\frac{a}{2})} = \eta^{\alpha+\beta}(\frac{k_2}{k_1})(C_2e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})} - C_2'e^{ik_2(b+\frac{a}{2})}) \end{cases} \tag{1.91}$$

II-2-2-5-6-b-Raccord des régions II et III :

La continuité de la fonction d'onde en $x = -\frac{a}{2}$

$$\begin{aligned} m_2^{\alpha}\psi_{II}(-(\frac{a}{2}) &= m_1^{\beta}\psi_{III}(-(\frac{a}{2}) \Rightarrow m_2^{\alpha}(C_2e^{-ik_2(\frac{a}{2})} - C_2'e^{ik_2(\frac{a}{2})}) \\ &= m_1^{\alpha}(C_3e^{-ik_1(\frac{a}{2})} + C_3'e^{ik_1(\frac{a}{2})}) \end{aligned} \tag{1.92}$$

La continuité de la dérivée :

$$\begin{aligned} m_2^{\alpha+\beta}\psi_{II}'(-\frac{a}{2}) &= m_1^{\alpha+\beta}\psi_{III}'(-(\frac{a}{2}) \Rightarrow m_2^{\alpha+\beta}(ik_2)(C_2e^{-ik_2(\frac{a}{2})} + C_2'e^{ik_2(\frac{a}{2})}) \\ &= m_1^{\alpha+\beta}(ik1)(C_3e^{-ik_1(\frac{a}{2})} - C_3'e^{ik_1(\frac{a}{2})}) \end{aligned} \tag{1.93}$$

Alors :

$$\begin{cases} (C_3e^{-ik_1(\frac{a}{2})} + C_3'e^{ik_1(\frac{a}{2})}) = \eta^{\alpha}(C_2e^{-ik_2(\frac{a}{2})} + C_2'e^{ik_2(\frac{a}{2})}) \\ (C_3e^{-ik_1(\frac{a}{2})} - C_3'e^{ik_1(\frac{a}{2})}) = \eta^{\alpha+\beta}(\frac{k_2}{k_1})(C_2e^{-ik_2(\frac{a}{2})} - C_2'e^{ik_2(\frac{a}{2})}) \end{cases} \tag{1.94}$$

II-2-2-5-6-c-Raccord des régions III et IV :

La Continuité de la fonction d'onde en $x = \frac{a}{2}$:

$$\begin{aligned} m_1^{\alpha}\psi_{III}(\frac{a}{2}) &= m_2^{\alpha}\psi_{IV}(\frac{a}{2}) \Rightarrow m_1^{\alpha}(C_3e^{ik_1(\frac{a}{2})} + C_3'e^{-ik_1(\frac{a}{2})}) \\ &= m_2^{\alpha}(C_4e^{ik_2(\frac{a}{2})} + C_4'e^{-ik_2(\frac{a}{2})}) \end{aligned} \tag{1.95}$$

La continuité de la dérivée :

$$\begin{aligned} m_2^{\alpha+\beta}\psi'_{III}(\frac{a}{2}) &= m_2^{\alpha+\beta}\psi'_{IV}(\frac{a}{2}) \Rightarrow m_1^{\alpha+\beta}(ik_1)(C_3e^{ik_1(\frac{a}{2})} - C'_3e^{-ik_1(\frac{a}{2})}) \\ & \quad m_2^{\alpha+\beta}(ik_2)(C_4e^{ik_2(\frac{a}{2})} - C'_4e^{-ik_2(\frac{a}{2})}) \end{aligned} \tag{1.96}$$

Alors :

$$\begin{cases} (C_3e^{ik_1(\frac{a}{2})} + C'_3e^{-ik_1(\frac{a}{2})}) = \eta^{\alpha}(C_4e^{ik_2(\frac{a}{2})} + C'_4e^{-ik_2(\frac{a}{2})}) \\ (C_3e^{ik_1(\frac{a}{2})} - C'_3e^{-ik_1(\frac{a}{2})}) = \eta^{\alpha+\beta}(\frac{k_2}{k_1})(C_4e^{ik_2(\frac{a}{2})} - C'_4e^{-ik_2(\frac{a}{2})}) \end{cases} \tag{1.97}$$

II-2-2-5-6-d-Raccord des régions IV et V :

Les conditions de continuité en $x = b + \frac{a}{2}$:

La continuité de la fonction :

$$\begin{aligned} m_2^{\alpha}\psi_{IV}(b + \frac{a}{2})) &= m_1^{\alpha}\psi_V(b + \frac{a}{2}) \Rightarrow \\ m_2^{\alpha}(C_4e^{ik_2(b+\frac{a}{2})} + C'_4e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})}) &= m_1^{\alpha}(C_5e^{ik_1(b+\frac{a}{2})}) \end{aligned} \tag{1.98}$$

La continuité de la dérivée :

$$\begin{aligned} m_1^{\alpha+\beta}\psi'_V(b + \frac{a}{2}) &= m_2^{\alpha+\beta}\psi'_{IV}(b + \frac{a}{2}) \Rightarrow \\ m_1^{\alpha+\beta}(ik_1)(C_5e^{ik_1(b+\frac{a}{2})}) &= m_2^{\alpha+\beta}(ik_2)(C_4e^{ik_2(b+\frac{a}{2})} - C'_4e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})}) \end{aligned} \tag{1.99}$$

Alors :

$$\begin{cases} C_5e^{ik_1(b+\frac{a}{2})} = \eta^{\alpha}(C_4e^{ik_2(b+\frac{a}{2})} + C'_4e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})}) \\ C_5e^{ik_1(b+\frac{a}{2})} = \eta^{\alpha+\beta}(\frac{k_2}{k_1})(C_4e^{ik_2(b+\frac{a}{2})} - C'_4e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})}) \end{cases} \tag{1.100}$$

II-2-2-5-6-e-Coefficient de transmission T et de réflexion R :

Les deux équations (1.100) donnent :

$$\begin{cases} C_4 = \frac{\eta^{\beta}(1+\frac{k_2}{k_1})}{2\eta^{\alpha+\beta}(\frac{k_2}{k_1})} e^{ik_1(b+\frac{a}{2})} e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})} \\ C'_4 = \frac{\eta^{\beta}(\frac{k_2}{k_1}-1)}{2\eta^{\alpha+\beta}(\frac{k_2}{k_1})} e^{ik_1(b+\frac{a}{2})} e^{ik_2(b+\frac{a}{2})} \end{cases} \tag{1.101}$$

On pose :

$$\begin{cases} C_4 = N_0 C_5 \\ C'_4 = N_1 C_5 \end{cases} \tag{1.102}$$

Les deux équations (1.94)donnent :

$$\begin{cases} C_3 = \frac{\eta^{\alpha} e^{ik_2(\frac{a}{2})} N_0(\eta^{\beta} 1+\frac{k_2}{k_1}) + \eta^{\alpha} e^{-ik_2(\frac{a}{2})} N_1(1-\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1})}{2} e^{-ik_2(\frac{a}{2})} C_5 \\ C'_3 = \frac{\eta^{\alpha} e^{ik_2(\frac{a}{2})} N_0(1-\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1}) + \eta^{\alpha} e^{-ik_2(\frac{a}{2})} N_1(1+\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1})}{2} e^{ik_2(\frac{a}{2})} C_5 \end{cases} \tag{1.103}$$

Prenons :

$$\begin{cases} C_3 = N_2 C_5 \\ C'_3 = N_3 C_5 \end{cases} \tag{1.104}$$

Les deux équations (1.97)donnent :

$$\begin{aligned} C_2 &= \frac{e^{-ik_1(\frac{a}{2})} N_2(\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1}+1) + e^{ik_1(\frac{a}{2})} N_3(\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1}-1)}{2\eta^{\alpha+\beta}\frac{k_2}{k_1}} e^{ik_2(\frac{a}{2})} C_5 \\ C'_2 &= \frac{e^{-ik_1(\frac{a}{2})} N_2(\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1}-1) + e^{ik_1(\frac{a}{2})} N_3(\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1}+1)}{2\eta^{\alpha+\beta}\frac{k_2}{k_1}} e^{-ik_2(\frac{a}{2})} C_5 \end{aligned} \tag{1.105}$$

On pose :

$$\begin{cases} C_2 = N_4 C_5 \\ C'_2 = N_5 C_5 \end{cases} \tag{1.106}$$

Les deux équations (1.94)donnent :

$$C_1 = \frac{\eta^{\alpha} e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})} N_4(\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1}+1) + \eta^{\alpha} e^{ik_2(b+\frac{a}{2})} N_5(1-\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1})}{2} e^{ik_1(b+\frac{a}{2})} C_5 \tag{1.107}$$

On introduit le coefficient de transmission T des barrières $T = \left|\frac{C_5}{C_1}\right|^2$ étant donné que dans les régions (I) et (V) la fonction d'onde admet le même vecteur d'onde k_1, d'où :

$$T = \left|\frac{C_5}{C_1}\right|^2 = \left|\frac{2e^{-ik_1(b+\frac{a}{2})}}{\eta^{\alpha} e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})} N_4(\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1}+1) + \eta^{\alpha} e^{ik_2(b+\frac{a}{2})} N_5(1-\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1})}\right|^2 \tag{1.108}$$

Et le coefficient R :

$$R = \left|\frac{C_1'}{C_1}\right|^2 = \left|\frac{\eta^{\alpha} e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})} N_4(1-\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1}) + \eta^{\alpha} e^{ik_2(b+\frac{a}{2})} N_5(\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1}+1)}{\eta^{\alpha} e^{-ik_2(b+\frac{a}{2})} N_4(1+\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1}) + \eta^{\alpha} e^{ik_2(b+\frac{a}{2})} N_5(1-\eta^{\beta}\frac{k_2}{k_1})}\right|^2 \tag{1.109}$$

II-2-2-5-7- Les courbes des coefficients de transmission pour une double barrière rectangulaires du potentiel et une masse :

Afin d'étudier l'influence du choix du paramètre d'ambiguïté β ($\beta = 0$, figure -5-, $\beta = -\frac{1}{2}$, figure-6-, $\beta = -1$, figure -7-) sur le comportement du coefficient de transmission en fonction de l'énergie, en premier lieu on fait varier le rapport de masse $\frac{m_2}{m_1}(\frac{m_2}{m_1} = \frac{1}{6})$(figure-7-) tout en maintenant fixe le rapport entre la distance inter barrières a et la largeur commune des barrières b ($a = 2b$).

Les paramètres géométriques de la double barrière ont été choisis comme suit : $b = \pi\hbar(m_1\nu_0)^{-1/2}$.

II-2-2-5-7-1-Cas où le rapport des masses m_2/m_1 varie où la distance inter barrière a et fixe$a = 2b$:

1-a-Le paramètre d'ambiguïté vaut $\beta = 0$:

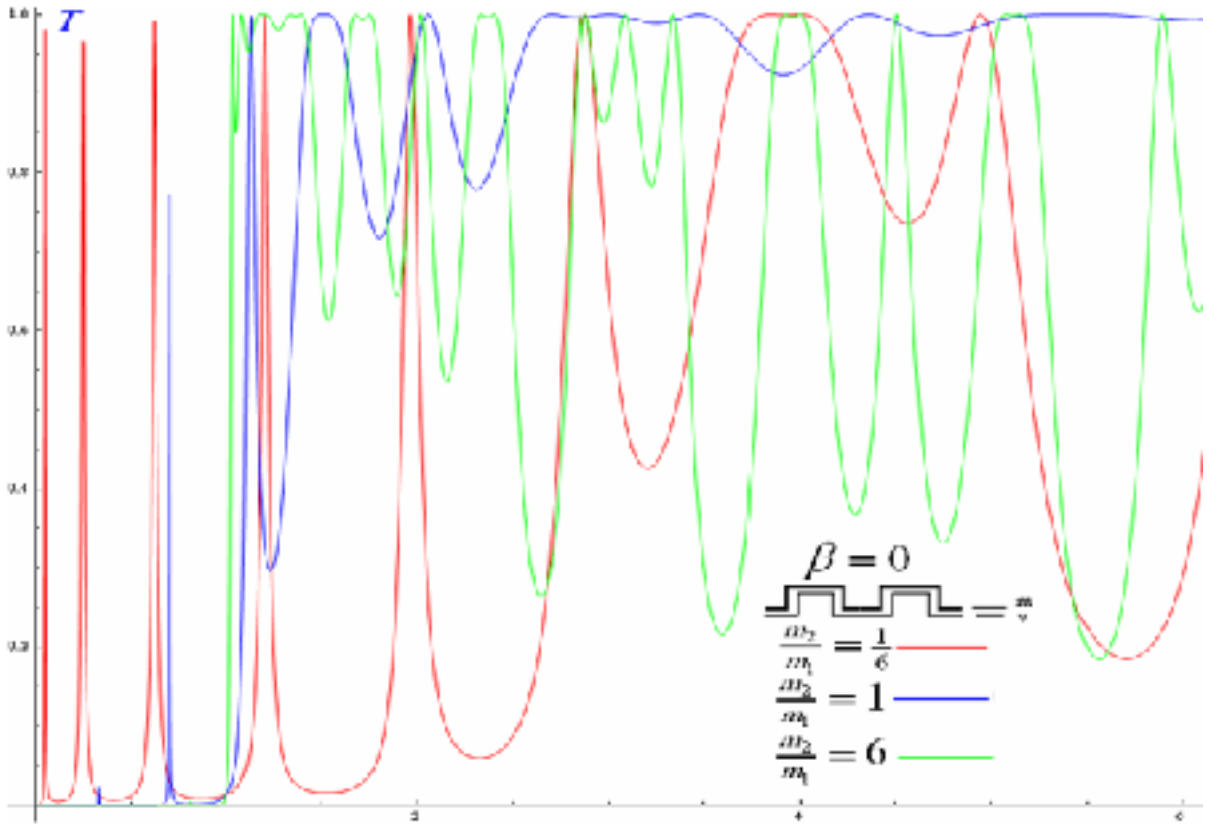


Figure –5- : Coefficient de transmission en fonction de l'énergie : cas d'une double barrière rectangulaire en potentiel et en masse pour un coefficient d'ambiguïté $\beta = 0$.

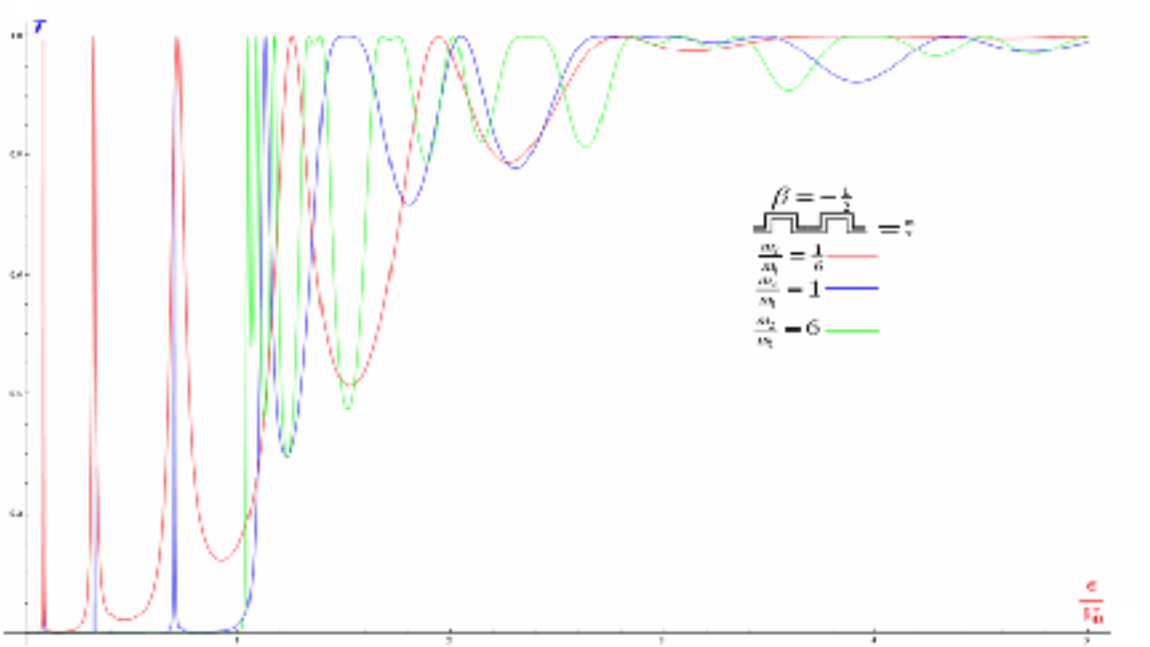
-Pour le cas $m_2/m_1 = 1$, on observe une transparence à77% par effet tunnel quand $\varepsilon < V_0$. $\varepsilon < V_0$ Pour, le coefficient de transmission subit des oscillations amorties très rapides jusqu'à la valeur $\varepsilon = 4V_0$. Puis de légères oscillations amorties et enfin à partir de la valeur $\varepsilon = 6V_0$ la transmission devient quasiment complète.

-Lorsque $m_2/m_1 = 1/6$ et quand $\varepsilon < V_0$, on observe trois pics de transmission par effet tunnel. Pour $\varepsilon < V_0$, le coefficient de transmission oscille lentement entre des valeurs minimales de l'ordre de 2% de transparence et l'unité. Il est remarquable qu'autour de la valeur $\varepsilon = 4V_0$ non seulement la transparence est maximale mais de plus la courbe y est assez large. Puis quand l'énergie devient supérieure à $5V_0$ elle se remet à osciller atteignant des transparences très basses de l'ordre de 8% et les intervalles entre deux transparences totales deviennent de plus en plus grands.

-Quand $m_2/m_1 = 1/6$ on n'observe aucun effet tunnel. Pour $\varepsilon > V_0$, le coefficient de transmission oscille rapidement entre l'unité et des valeurs minimales bien au dessus du cas précédent ($m_2/m_1 = 1/6$). On remarque que le nombre de points de transparences totales est nettement plus grand qu'au cas précédent.

1-b-Le paramètre d'ambiguïté vaut $\beta = -\frac{1}{2}$:

6



7.png

Figure-6- : Coefficient de transmission en fonction de l'énergie : cas d'une double barrière rectangulaire en potentiel et en masse pour un coefficient d'ambiguïté $\beta = -1/2$.

-Pour $m_2/m_1 = 1/6$ on observe trois pics de transparence dont le plus élevé est à 92%. Pour $\varepsilon > V_0$, le coefficient de transmission subit des oscillations amorties très rapides atteignant quasiment la transmission complète déjà à partir de la valeur $\varepsilon = 5V_0$.

-Lorsque $m_2/m_1 = 1/6$ on observe trois pics de transmission quasiment totale. Pour $\varepsilon > V_0$, le coefficient de transmission subit des oscillations amorties très rapides atteignant la transmission complète déjà à partir de la valeur $\varepsilon = 3.6V_0$. On remarque que les transparences totales sont atteintes pour des énergies supérieures au cas d'une masse constante.

-Quand $m_2/m_1 = 1/6$ aucun effet tunnel n'est observé. Pour $\varepsilon > V_0$, le coefficient de transmission subit lui aussi des oscillations amorties très rapides atteignant la transmission complète à partir de la valeur $\varepsilon = 5V_0$. On observe que la transparence totale est atteinte plus fréquemment et à des énergies plus basses que dans les deux cas précédents.

1-c-Le paramètre d'ambiguïté vaut $\beta = -1$:

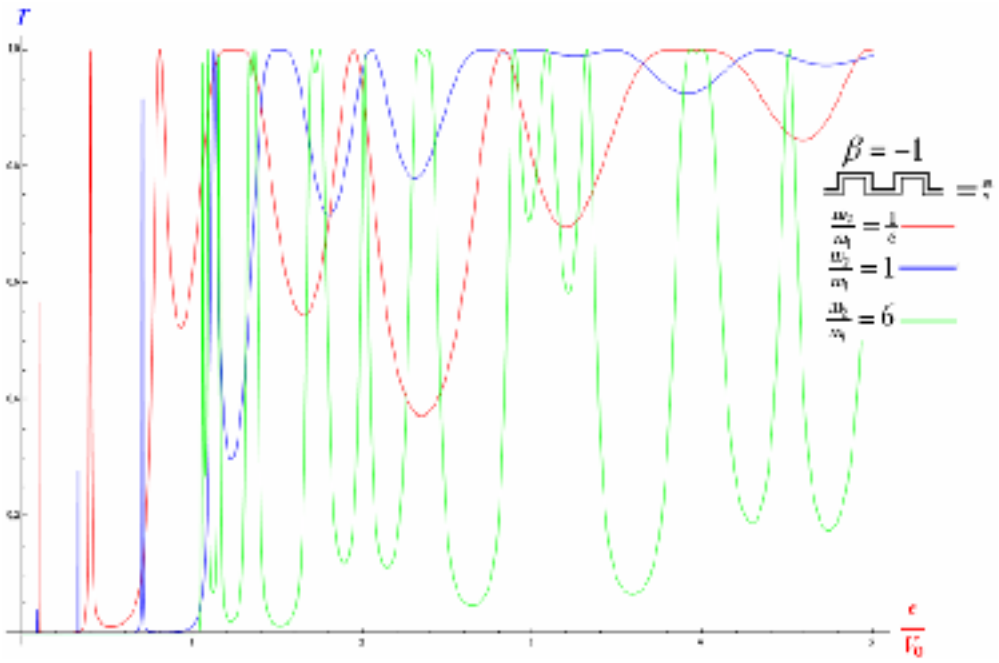


Figure-7- : Coefficient de transmission en fonction de l'énergie : cas d'une double barrière rectangulaire en potentiel et en masse pour un coefficient d'ambiguïté $\beta = -1$.

-Pour $m_2/m_1 = 1$ on observe trois pics de transparence dont le plus élevé est à 92%. Pour $\varepsilon > V_0$, le coefficient de transmission subit des oscillations amorties très rapides atteignant pratiquement la transmission complète déjà à partir de la valeur $\varepsilon = 5V_0$.

-Lorsque $m_2/m_1 = 1/6$ on observe trois pics de transmission le premier à 57% les deux suivants atteignent quasiment l'unité. Pour $\varepsilon > V_0$, le coefficient de transmission subit des oscillations amorties très rapides atteignant sa valeur minimale de 37% pour $\varepsilon = 2.4V_0$. Puis quand l'énergie augmente les oscillations se rapprochent de plus en plus de l'unité. Il est remarquable qu'autour de la valeur $\varepsilon = 4V_0$ non seulement la transparence est maximale mais de plus la courbe y est assez large.

-Quand $m_2/m_1 = 6$ on n'observe aucun effet tunnel. Pour $\varepsilon > V_0$, le coefficient de transmission oscille rapidement entre l'unité et des valeurs minimales très basses. On remarque que le nombre de points de transparences totales est nettement plus grand qu'aux cas précédents.

1-d-Récapitulatif :

Effet tunnel :

$\beta = 0$			$\beta = -1/2$			$\beta = -1$		
3	1	0	3	3	0	3	3	0
$m_1 > m_2$	$m_1 = m_2$	$m_1 < m_2$	$m_1 > m_2$	$m_1 = m_2$	$m_1 < m_2$	$m_1 > m_2$	$m_1 = m_2$	$m_1 < m_2$

Tableau 1 : Nombre de résonnances par effet tunnel

On remarque que lorsque la masse m_1 est inférieure à la masse m_2 il n'y a pas d'effet tunnel. Pour les autres rapports de masse le nombre de résonnances par effet tunnel est quasiment identique pour les trois valeurs du paramètre d'ambiguïté β, mis à part le cas isolé ($\beta = 0$, $m_1 = m_2$).

Allure de $T(\varepsilon/V_0)$: On observe que, lorsque la masse $m1$ est inférieure à la masse $m2$,

le nombre de points de transparences totales est nettement plus grand et que la largeur des pics de résonnance est nettement plus étroite que dans les cas $m1 > m2$ et$m1 = m2$, Quant au comportement quand l'énergie devient très grande on relève que le coefficient de transmission tend asymptotiquement vers l'unité uniquement dans les cas : ($\beta = 0$, $m_1 = m_2$), ($\beta = -1/2, m_1, m_2$), ($\beta = -1$, $m_1 = m_2$ et $m_1 < m_2$), autrement il continue à osciller.

1.2 Conclusion

Dans ce chapitre, Nous avons traité premièrement l'équation de Schrödinger ordinaire et sa résolution dans le cas générale et le cas des coordonnés sphériques. Deuxièmement, nous avons traité l'équation de Schrödinger généralisée.

Tout d'abord, Nous donnons un rappel historique sur les travaux les plus importants qui sont réalisés par des auteurs dans le domaine de l'hamiltonien effectif généralisé, ainsi que les valeurs proposés pour les paramètres d'ambiguïté (α,β,γ), et présenté l'équation de Schrödinger généralisée par l'hamiltonien effectif généralisé pour un potentiel et une masse variable en fonction de la position. Puis, nous avons etudié la résolution de l'équation de Schrödinger généralisée indépendant du temps pour une barrière rectangulaire en potentiel et en masse, puis pour une double barrière rectangulaire en potentiel et en masse. Nous avons effectué un calcul analytique des fonctions d'onde ainsi que les coefficients de transmission et de réflexion avec une énergie supérieure au potentiel.

Nous avons fait aussi une analyse multi-variable des courbes des coefficients de transmission en fonction des variations de l'énergie, du rapport des masses, des paramètres d'ambiguïté (α,β), et de la distance inter barrière. Avec une étude comparative entre les trois exemples nous avons essentiellement remarqué que relativement au cas d'une barrière rectangulaire unique la configuration de deux barrières rectangulaires présente un plus grand nombre de pics de résonance et leurs largeurs sont plus étroites. de plus pour le cas trivial $m_1 = m_2$ le coefficient de transmission ne tend pas vers l'unité quand l'énergie augmente indéfiniment .

Chapitre 2

La méthode Nikiforov -Uvarof

2.1 Introduction

La résolution de l'équation de Schrödinger reste un problème très important à l'esprit des physiciens théoriciens, et qui les a poussés à penser trouver plusieurs méthodes pour différents systèmes physiques.

Parmi ces méthodes : l'approche supersymétrique [23 – 24], la méthode variationelle de Ritz, la méthode algébrique[25], la méthode de l' invariant[26] , l'approche de l'intégrale de chemin et la méthode de Nikiforov -Uvarov [27].

On va traiter dans ce chapitre la méthode de Nikiforov - Uvarov pour résoudre l'équation de Schrödinger lorsque sa masse est constante, parce qu'elle est la méthode la plus appropriée pour obtenir une solution analytique à une telle équation différentielle .

2.2 Définition

La méthode Nikiforov-Uvarov NU fractionnaire conformable au moyen d'une dérivée fractionnaire conformable qui est la définition la plus naturelle dans le calcul non entier, représente un outil mathématique pour résoudre les équations différentielles du seconde ordre à coefficients variables sous forme de polynômes de types hypergéométriques au moyen des fonctions spéciales orthogonales pour un potentiel connu, l'équation de Schrödinger comme des équations en coordonnées sphériques sont réduites à une équation généralisée de types hypergéométriques avec un approprié du même rang de la transformation $r \rightarrow s$ et alors elles peuvent être résolues systématiquement pour trouver la solution exacte ou solution particulière.

Dans ce qui suit nous expliquons en détail la méthode Nikiforov-Uvarov pour la résolution d'équation de type hypergéométrique publiée dans le livre (Fonction Spéciales de la physique

Mathématique) "Nikiforov -Uvarov 1988"[27]

2.3 L'équation différentielle pour les fonctions spéciales de la physique

Parmi les grands nombres de problèmes importants de la physique théorique et mathématique, on est conduit à l'équation différentielle

$$u'' + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}u' + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}u = 0, \tag{2.1}$$

$$\sigma^2(z)u'' + \sigma(z)\tilde{\tau}(z)u' + \tilde{\sigma}(z)u = 0.$$

avec $\sigma(z)$ et $\tilde{\sigma}(z)$ sont des polynômes de degré inferieur à 2, et $\tilde{\tau}(z)$ un polynôme de degré non supérieur à 1. On rencontre des équations de ce type en résolvant les équations de Laplace et d'Helmholtz en coordonnées curvilignes par séparation des variables, dans les problèmes fondamentaux de la mécanique quantique : mouvement d'une particule dans un champ à symétrie sphérique, oscillateur harmonique, recherche des solutions de l'équation de Schrödinger, de Dirac et de Klein-Gordon pour le potentiel coulombien, mouvement d'une particule dans un champ électrique ou magnétique homogène.

L'équation (2.1) apparaît également dans bon nombre de problèmes modèles de la physique atomique, moléculaire et nucléaire.

Les équations de type (2.1) admettent comme solutions particulières des fonctions spéciales appartenant aux classes suivantes :

-polynômes orthogonaux classiques (polynômes de Jacobi, de Laguerre et d'Hermite) ;

-fonctions sphériques ;

-fonctions cylindriques ;

-fonctions hypergéométriques

ces fonctions sont souvent appelées fonctions spéciales de la physique mathématique.

Dans le texte qui suit, nous admettrons partout que la variable z et les coefficients des polynômes $\sigma(z)$, $\tilde{\sigma}(z)$ et $\tilde{\tau}(z)$ sont susceptibles de prendre toutes valeurs réelles ou complexes.

Essayons de mettre l'équation (2.1) sous une forme plus simple au moyen du changement $u(z) = \varphi(z)\ y(z)$ et d'un choix particulier de la fonction $\varphi(z)$.

Il vient :

$$y'' + (2\frac{\varphi'}{\varphi} + \frac{\tilde{\tau}}{\sigma})y' + (\frac{\varphi''}{\varphi} + \frac{\varphi'}{\varphi}\frac{\tilde{\tau}}{\sigma} + \frac{\tilde{\tau}}{\sigma^2})y = 0 \tag{2.2}$$

En vue de rendre (2.2) plus simple que (2.1), on donnera au coefficient y' l'aspect $\tau(z)/\sigma(z)$, où $\tau(z)$ est un polynôme de degré non supérieur à 1. la fonction $\varphi(z)$ se définira alors par l'équation

$$\frac{\varphi'}{\varphi} = \pi(z)/\sigma(z) \tag{2.3}$$

dans laquelle

$$\pi(z) = \frac{1}{2}[\tau(z) - \tilde{\tau}(z)] \tag{2.4}$$

est un polynôme de degré non supérieur à 1. puisque

$$\frac{\varphi''}{\varphi} = (\frac{\varphi'}{\varphi})' + (\frac{\varphi'}{\varphi})^2 = (\frac{\pi}{\sigma})' + (\frac{\pi}{\sigma})^2$$

l'équation (2.2) devient

$$y'' + \frac{\tau(z)}{\sigma(z)}y' + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma^2(z)}y = 0 \tag{2.5}$$

avec

$$\tau(z) = \tilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \tag{2.6}$$

$$\bar{\sigma}(z) = \tilde{\sigma}(z) + \pi^2(z) + \pi(z)[\tau(\tilde{z}) - \sigma'(z)] + \pi'(z)\sigma(z). \tag{2.7}$$

les fonctions $\tau(z)$, $\bar{\sigma}(z)$ sont deux polynômes de degrés non supérieurs à 1 et à 2 respectivement. L'équation(2.6) est donc du même type que (2.1). Nous avons trouvé de cette façon la classe des transformations qui laissent inchangé le type de l'équation : ce sont les transormations qu'on fait subir à l'équation (2.1) en opérant le changement $u = \varphi(z)y$, ou la fonction $\varphi(z)$ vérifie l'équation (2.3), quelque soit le polynôme du premier degré $\pi(z)$.

L'arbitraire dans le choix $\pi(z)$ nous permettra de choisir, parmi les formes possibles de l'équation (2.6), celle qui est la plus simple et qui se prête le mieux à la discussion. choisissant les coefficients du polynôme $\pi(z)$ de telle façon que le polynôme $\bar{\sigma}(z)$ figurant dans l'équation (2.6), soit un multiple exact de $\sigma(z)$, i. e :

$$\bar{\sigma}(z) = \lambda\sigma(z) \tag{2.8}$$

λ est une constante. Cela est possible, car, en identifiant les coefficients qui affectent les puissances correspondantes de z dans les deux membres de l'égalité l'équation (2.9), on obtient trois équations pour trois constantes inconnues : la constante λet deux coefficients du $\pi(z)$. l'équation (2.6)deviendra donc :

$$\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0 \tag{2.9}$$

Nous dirons que (2.9) est une équation du type hypergéométrique. Il sera donc tout naturel d'appeler l'équation (2.1) équation généralisée du type hypergéométrique.

pour définir le polynôme $\pi(z)$ et la constante λ, mettons la condition l'équation (2.8) sous la forme

$$\pi^2 + (\tilde{\tau} - \sigma')\pi + \tilde{\sigma} - k\sigma = 0$$

où

$$k = \lambda - \pi'(z) \tag{2.10}$$

supposant provisoirement la constante k connue, on peut expliciter $\pi(z)$ dans l'équation du second degré :

$$\pi(z) = \frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{(\frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2})^2 - \tilde{\sigma} + k\sigma} \tag{2.11}$$

$\pi(z)$ étant un polynôme, le radicant doit être le carré d'un polynôme. pour qu'il en soit ainsi, il faut que soit nul le discriminant du second degré sous le signe de la racine. cette condition nous conduit à l'équation, en général du second degré, pour la constante k.

Une fois k trouvé, on cherche $\pi(z)$ par la formule (2.11), puis $\varphi(z), \tilde{\tau}(z)$ et λ à l'aide des formules (2.3) et , (2.6) et (2.10). Il est évident qu'il existe plus d'une possibilité de réduire l'équation (2.1) à l'équation du du type hypergéométrique (2.9), possibilités fournies par le choix de la constante k et celui du signe de $\pi(z)$ dans la formule (2.11).

Grâce à la transformation proposée, on aura à discuter, au lieu de l'équation (2.1), une équation plus simple du type (2.9)

Une tendance commune qui a été suivie pour généraliser les solutions de l'équation (2.9)

est de montrer que toutes les dérivées de fonctions de type hypergéométrique sont également de type hypergéométrique. À cet effet, Eq. (2.9) se différencie en utilisant la représentation $\upsilon_1(z) = y'(z)$

$$\sigma(z)\upsilon_1''(z) + \tau_1(z)\upsilon_1'(z) + \mu_1\upsilon_1(z) = 0 \tag{2.12}$$

où $\tau_1(z) = \tau(z) + \sigma'(z)$ et $\mu_1 = \lambda + \tau'(z)$

$\tau_1(z)$ est un polynôme de degré au plus 1 et $\mu_1$est un paramètre indépendant de la variable z. L'équation (2.12) est une équation de type hypergéométrique.

On pose que : $\upsilon_2(z) = y''(z)$ comme une nouvelle représentation, donc la dérivée de l'équation (2.9) devient

$$\sigma(z)\upsilon_2''(z) + \tau_2(z)\upsilon_2'(z) + \mu_2\upsilon_2(z) = 0 \tag{2.13}$$

Avec

$$\tau_2(z) = \tau_1(z) + \sigma'(z) = \tau(z) + 2\sigma'(z) \tag{2.14}$$

$$\mu_2 = \mu_1 + \tau_1'(z) = \lambda + 2\tau'(z) + \sigma"(z) \tag{2.15}$$

De la même manière, une équation de type hypergéométrique peut être construite comme une famille de solutions particulières de l'équation (2.9), en prenant $\upsilon^n(z) = y^{(n)}(z)$

$$\sigma(z)\upsilon_n''(z) + \tau_n(z)\upsilon_n'(z) + \mu_n\upsilon_n(z) = 0 \tag{2.16}$$

et ici les relations générales de récurrence pour $\tau_n(z)$ et μ_n sont trouvés comme suit, respectivement

$$\tau_n(z) = \tau(z) + n\sigma'(z) \tag{2.17}$$

$$\mu_n = \lambda + n\tau'(z) + \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(z) \tag{2.18}$$

Quand $\mu_n = 0$, l'équation (1.18) devient

$$\lambda_n == -n\tau'(z) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma"(z), \qquad (n = 0, 1, 2, ...) \tag{2.19}$$

puis l'équation (2.16) a une solution particulière de la forme $y(z) = y_n(z)$ qui est un polynôme de degré n, Pour obtenir une solution des valeurs propres par la méthode Nikiforov-Uvarov, on obtient que

la relation entre λ etλ_n doivent être configurés au moyen de l'équation (2.10) et l'équation (2.19). avec y_n est une fonction de type hypergéométrique dont les solutions polynomiales sont données par la relation de Rodrigues

$$y_n(z) = \frac{B_n}{\rho(z)} \frac{d^n}{ds^n}[\sigma^n(z)\rho(z)] \tag{2.20}$$

où $B_n$est une constante de normalisation et la fonction de poids $\rho(z)$ doit satisfaire la condition ci- dessous

$$(\sigma(z)\rho(z))' = \tau(z)\rho(z) \tag{2.21}$$

Exemple : Mettons sous la forme (2.9) l'équation de Bessel

$$z^2u'' + zu' + (z^2 - v^2)u = 0$$

on pose que $u = \varphi(z)y$. L'équation de Bessel est un cas particulier de l'équation (2.1) pour $\sigma(z) = z$, $\tilde{\tau}(z) = 1$, $\tilde{\sigma}(z) = z^2 - v^2$. Le radicant de (2.11) se présente alors sous la forme $-z^2 + v^2 + kz$.

Annulant le discriminant (Δ) de ce trinôme du second degré,

$$k^2 + 4v^2 = 0,$$

d'où $k = \pm 2iv$. L'on a donc, en vertu de(2.11),

$$\pi(z) = \pm\sqrt{-z^2 + v^2 \pm 2ivz} = \pm(iz \pm v)$$

Ainsi donc, dans le cas considéré le polynôme $\pi(z)$ peut se mettre sous quatre formes différentes. Plaçons-nousdans le cas où $k = 2iv$, $\pi(z) = iz + v$ par exemple. les formules (2.3), (2.6) et (2.10) nous donnent :

$$\varphi(z) = z^v e^{iv}$$

$$\tau(z) = 2iz + 2v + 1,$$

$$\lambda = k + \pi'(z) = i(2v+1)$$

L'équation (2.9) devient finalement

$$zy'' + (2iz + 2v + 1)y' + i(2v+1)y = 0.$$

Remarques

1. Puisque l'équation (2.1) ne change pas lorsqu'on multiplie $\sigma(z)$ et $\tilde{\tau}(z)$ par c et $\tilde{\sigma}(z)$ par c^2, (avec c étant une constante quelconque), on peut admettre que le coefficient affectant le terme du plus haut degré du polynôme $\sigma(z)$ est égal à un nombre donné. cette remarque reste aussi vraie pour l'équation (2.9).

2. Dans la suite, on se borne à considérer les cas où, dans les équation (2.1) et (2.9), le polynôme $\sigma(z)$ n'admet pas de racines multiplets. En effet, si le polynôme $\sigma(z)$ admet des racines multiples, i. e. $\sigma(z) = (z-a)^2$, il suffit de faire le changement $z - a = 1/s$ pour ramener l'équation (2.1) à la forme

$$\frac{d^2u}{ds^2} + \frac{2 - s\tilde{\tau}(a+1/s)}{s}\frac{du}{ds} + \frac{s^2\tilde{\sigma}(a+1/s)}{s^2}u = 0 \tag{2.22}$$

Les expressions $s\tilde{\tau}(a+1/s)$ et $s^2\tilde{\sigma}(a+1/s)$ sont deux polynômes de degrés non supérieurs à 1 et à 2 respectivement en s. Aussi l'équation (2.22) est une équation du type (2.1) dont le polynôme $\sigma(z)$ est égal à s. et n'admet donc pas de possibles racines multiples.

3. Il n'est pas possible de réécrire l'équation (2.1) en une équation du type (2.9) par le procédé décrit si $\sigma(z) = 1$ et si l'expression $(\tilde{\tau}/2)^2 - \tilde{\sigma}$ est un polynôme du premier degré. Dans ce cas, pour réduire l'équation (2.1) à une forme plus simple. on peut choisir le polynôme $\pi(z)$ dans (2.3) de la condition $\tau(z) = 0$. Alors $\bar{\sigma}(z)$ devient un polynôme du premier degré, et l'équation (2.5) s'écrit

$$y'' + (az + b)y = 0 \tag{2.23}$$

Par un changement linéaire $s = az+b$, on ramène (2.23) à un cas particulier de l'équation

$$\frac{d^2y}{ds^2} + \frac{1-2\alpha}{s}\frac{dy}{ds} + [(\beta\gamma s^{\gamma-1})^2 + \frac{\alpha^2 - v^2\gamma^2}{s^2}]y = 0 \tag{2.24}$$

dans laquelle α, β, γ, v sont des constantes. les solutions de l'équation (2.24) s'expriment au moyen de fonctions cylindriques.

4. Un autre cas d'application des équations du type hypergéométrique est la solution des

équations différentielles simultanées du premier ordre

$$\left.\begin{aligned} u_1' &= a_{11}(z)u_1 + a_{12}(z)u_2, \\ u_2' &= a_{21}(z)u_1 + a_{22}(z)u_2 \end{aligned}\right\} \tag{2.25}$$

aux coefficients

$$a_{ik}(z) = \frac{\tau_{ik}(z)}{\sigma(z)} \tag{2.26}$$

où $\tau_{ik}(z)$ est un polynôme de degré non supérieur à 1, et $\sigma(z)$ un polynôme de degré non supérieur à 2, En éliminant la fonction $u_2(z)$ entre les équations (1.26), on obtient l'équation définissant $u_1(z)$:

$$u_1'' - (a_{11} + a_{22} + \frac{a_{12}'}{a_{12}})u_1' + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} + a_{11}\frac{a_{12}'}{a_{12}} - a_{11}')u_1 = 0 \tag{2.27}$$

Puisque

$$\frac{a_{12}'}{a_{12}} = -\frac{\sigma'}{\sigma} + \frac{\tau_{12}'}{\tau_{12}},$$

l'équation (2.27) sera une équation du type hypergéométrique pour $\tau_{12}' = 0$. Si $\tau_{12}' \neq 0$, on peut effectuer une transformation linéaire

$$v_1 = \alpha u_1 + \beta u_{2,}$$

$$v_2 = \gamma u_1 + \delta u_{2,}$$

$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ étant des constantes. on obtient alors un système d'équation du type

$$\left.\begin{aligned} v_1' &= \tilde{a}_{11}(z)v_1 + \tilde{a}_{12}(z)v_2 \\ v_2' &= \tilde{a}_{21}(z)v_1 + \tilde{a}_{22}(z)v_2 \end{aligned}\right\} \tag{2.28}$$

où les fonctions $\tilde{a}_{ik}(z)$ sont des combinaisons linéaires des fonctions a_{ik} (z) coefficients constants dépendant de $\alpha, \beta, \gamma, \delta$; elles s'écrivent donc :

$$\tilde{a}_{ik}(z) = \frac{\tilde{\tau}_{ik}(z)}{\sigma(z)},$$

$\tilde{\tau}_{ik}(z)$ est un polynôme de degré non supérieur à 1.

En choisissant les coefficients $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ de façon à avoir $\tilde{\tau}'_{12} = 0$(ce qui est toujours possible), on obtient, aprés avoir éliminé la fonction $v_2(z)$ entre les équations (2.28), une équation généralisée du type hypergeométrique pour les fonctions $v_1(z)$.

Au cas où $\sigma(z)$ est un polynôme du premier degré, on peut passer de l'équation (2.25) à l'équation généralisée du type hypergéométrique par un procédé différent, en choisissant les constantes $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ de telle façon que le coefficient $\tilde{a}_{12}$ soit indépendant de z, i. e. $\tau_{12} = v\ \sigma(z)$(v étant une constante)

2.4 L'application de la méthode de Nikiforov -Uvarov

Il y a eu un regain d'intérêt pour la résolution des systèmes mécaniques quantiques simples dans le cadre de la méthode Nikiforov-Uvarov (N-U). Cette technique algébrique est basé sur la résolution des équations différentielles linéaires du deuxième ordre, qui a été utilisée pour résoudre avec succès des équations de Schrödinger, Dirac, Klein - Gordon et Duffin - Kemmer - Petiau en présence de certains potentiels centraux et non centraux bien connus.

Dans ce qui suit, Nous appliquons la méthode de NU pour résoudre l'équation de Schrödinger lorsque la masse est constante pour le potentiel de Morse et les équations de Klein-Gordon et de Dirac pour un champ coulombien [28].

2.4.1 Résolution de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse

Le potentiel de Morse, nommé d'après le physicien Philip Morse qui a introduit une forme analytique très importante d'énergie potentiel pour une molécule diatomique.

Dans ce qui suit, nous essayerons d'obtenir la solution de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse.

Pour un système moléculaire diatomique de masse réduite μ, le potentiel de Morse peut être écrit comme :

$$V(r) = D_e[e^{-2a(r-r_e)} - 2e^{-a(r-r_e)}] \qquad (D_e > 0, a > 0, r_e > 0) \tag{2.29}$$

Où D_e : est l'énergie de dissociation, r_e la distance internucléaire d'équilibre, a est un paramètre (r_e et a sont deux paramètres positifs qui signifient la position d'équilibre des noyaux et la largeur du puits de potentiel).

Les vibrations d'une molécule diatomique peuvent être adéquatement par ce type de potentiel pour les ondes ($\ell = 0$). Si nous voulons calculer l'énergie de l'état lié à la rotation pour ($\ell \neq 0$), nous avons besoin de faire une approximation au potentiel de Morse.

Afin de calculer le spectre d'énergie à l'état lié et la fonction d'onde radiale correspondante, la fonction potentielle donnée par l'équation (2.29) est insérée dans l'équation radiale de Schrödinger :

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - D_e[e^{-2a(r-r_e)} - 2e^{-a(r-r_e)}] - \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}]R(r) = 0, \qquad (2.30)$$

où n et ℓ définissent respectivement les nombres quantiques vibrationnels et rotationnels, et E est l'énergie appropriée. On transforme $R(r)$ en $U(r)/r$, donc l'équation (2.30) devient

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - D_e[e^{-2a(r-r_e)} - 2e^{-a(r-r_e)}] - \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}]U(r) + 0 \qquad (2.31)$$

Une solution analytique de cette équation différentielle ne peut être obtenue sans une approximation, car l'équation (2.31) inclut à la fois des termes exponentiels et radiaux. Pour cette raison, nous décrivons une procédure donnée par Pekeris pour suggérer une approximation de la solution de l'équation de Schrödinger donnée dans l'équation(2.31).

L'approximation est basée sur l'expansion du terme centrifuge dans une série d'exponentielle en fonction de la distance internucléaire, en gardant les termes jusqu'au deuxième ordre. De cette façon, le terme centrifuge peut être réorganisé en gardant les paramètres dans le potentiel de Morse.

Cependant, par construction, cette approximation n'est valable que pour les états à faibles vibrations. Par conséquent, nous pouvons prendre en compte le terme rotationnel de la manière suivante, en utilisant l'approximation de Pekeris. Tout d'abord, nous simplifions la partie centrifuge de l'équation (2.31) en changeant la coordonnée $x = (r - r_e)/r_e$ au voisinage de $x = 0$. Par conséquent, il peut être développé en une série de puissance comme :

$$V_{rot}(x) = \frac{\eta}{(1+x)^2} = \eta(1 - 2x + 3x^2 - 4x^3 + ...), \qquad (2.32)$$

avec

$$\eta = \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\ell(\ell+1)}{r_e^2}, \qquad (2.33)$$

les premiers termes devraient être tout à fait suffisants, Nous remplaçons maintenant le

terme de rotation par le potentiel

$$\tilde{V}_{rot}(x) = \eta(D_0 + D_1 e^{-\delta x} + D_2 e^{-2\delta x}) \tag{2.34}$$

où $\delta = ar_e$ et D_i sont les coefficients tel que $i = \{0,\ 1,\ 2\}$. Sur ce point, l'expression de l'équation (2.32) peut être développée jusqu'aux termes x^3

$$\tilde{V}_{rot}(x) = \eta(D_0 + D_1(1 - \delta x + \frac{\delta^2 x^2}{2!} - \frac{\delta^3 x^3}{3!} + ...) + D_2(1 - 2\delta x + \frac{4\delta^2 x^2}{2!} - \frac{8\delta^3 x^3}{3!} + ...)), \tag{2.35}$$

$$\tilde{V}_{rot}(x) = \eta(D_0 + D_1 + D_2 - x(D_1\delta + 2D_2\delta) + x^2(D_1\frac{\delta^2}{2} + 2D_2\delta^2) - x^3(D_1\frac{\delta^3}{6} + D_2\frac{4\delta^2}{3}) + ...) \tag{2.36}$$

En combinant les puissances égales des équations (2.32) et (2.36), nous obtenons les relations entre les coefficients D_i et le paramètre δ comme suit :

$$\left.\begin{array}{c} D_0 = 1 - \frac{3}{\delta} + \frac{3}{\delta^2} \\ D_1 = \frac{4}{\delta} - \frac{6}{\delta^2} \\ D_2 = -\frac{1}{\delta} + \frac{3}{\delta^2} \end{array}\right\} \tag{2.37}$$

Maintenant, nous pouvons prendre le potentiel $\tilde{V}_{rot}$ au lieu du vrai potentiel de rotation V_{rot} et résoudre l'équation de Schrödinger pour $\ell \neq 0$ dans l'équation (2.31).

Afin d'appliquer la méthode Nikiforov-Uvarov, on réécrit l'équation (2.31) avec des nouvelles variables sous la forme $z = e^{-\delta x}$ et $U(r) \rightarrow u(z)$,

$$\frac{d^2u(z)}{dz^2} + \frac{1}{z}\frac{du(z)}{dz} + \frac{2\mu r_e^2}{\hbar^2\delta^2 z^2}[(E - \eta D_0) + (2D_e - \eta D_1)z - (D_e + \eta D_2)z^2]u(z) = 0 \tag{2.38}$$

En introduisant les paramètres adimensionnels suivants

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{2\mu r_e^2(E_{n\ell} - \eta D_0)}{\hbar^2\delta^2} \\ \beta &= \frac{2\mu r_e^2(2D_e - \eta D_1)}{\hbar^2\delta^2} \\ \gamma &= \frac{2\mu r_e^2(D_e - \eta D_2)}{\hbar^2\delta^2} \end{aligned} \tag{2.39}$$

Ce qui conduit à l'équation principale définie dans l'équation(2.1), nous pouvons réorganiser l'équation de Schrödinger:

$$\frac{d^2u}{dz^2} + \frac{1}{z}\frac{du}{dz} + \frac{1}{z^2}[-\gamma z^2 + \beta z - \alpha]u(z) = 0, \tag{2.40}$$

Après la comparaison de l'équation (2.1) et (2.40), on obtient les polynômes correspondants comme :

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}(z) &= 1, \\ \sigma(z) &= z, \\ \sigma(z) &= -\gamma z^2 + \beta z - \alpha \end{aligned} \tag{2.41}$$

En substituant ces polynômes dans l'équation (2.11), On trouve le polynôme $\pi(z)$:

$$\pi(z) = \pm\sqrt{\gamma z^2 + (k-\beta)z + \alpha} \tag{2.42}$$

On va prendre $\sigma'(z) = 1$. Le discriminant de l'expression ci-dessus sous la racine carrée doit être nul. Par conséquent, l'expression devient le carré d'un polynôme de premier degré

$$(k-\beta)^2 - 4\alpha\beta = 0 \tag{2.43}$$

En résolvant l'équation algébrique (2.43) on obtient ses doubles racines $k_\pm = \beta \pm 2\sqrt{\alpha\gamma}$. On remplace $k_\pm$ dans l'équation (2.42), les quatre possibles formes de $\pi(z)$sont obtenues :

$$\pi(z) = \pm \begin{cases} (\sqrt{\gamma}z + \sqrt{\alpha}) & , \quad \text{pour} \quad k_+ = \beta + 2\sqrt{\alpha\gamma} \\ (\sqrt{\gamma}z - \sqrt{\alpha}) & , \quad \text{pour} \quad k_- = \beta - 2\sqrt{\alpha\gamma} \end{cases} \tag{2.44}$$

Nous sélectionnons simplement l'une des quatre formes possibles de $\pi(z)$, on choisit la forme $\pi(z) = -(\sqrt{\gamma}z - \sqrt{\alpha})$ pour $k_- = \beta - 2\sqrt{\alpha\gamma}$, dans ce cas la dérivée de $\tau(z)$sera négative et donnée par l'équation (2.6). Par conséquent, $\tau(z)$ satisfait à l'exigence ci-dessous :

$$\begin{aligned} \tau(z) &= 1 + 2\sqrt{\alpha} - 2\sqrt{\gamma}z \\ \tau'(z) &= -2\sqrt{\gamma} < 0. \end{aligned} \tag{2.45}$$

De l'équation (2.10) nous obtenons

$$\lambda = \beta - 2\sqrt{\alpha\gamma} - \sqrt{\gamma} \tag{2.46}$$

et de l'équation (2.19), nous obtenons également

$$\lambda_n = 2n\sqrt{\gamma}. \tag{2.47}$$

On voit que le paramètre α est sous la forme suivante

$$\alpha = [\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}} - (n + \frac{1}{2})]^2 \tag{2.48}$$

On se rappelle que l'expression de $\lambda = \lambda_n$. On remplace les valeurs α, β et γ dans l'équation (2.48) ; donc, on peut déterminer le spectre d'énergie E comme

$$E = \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r_e^2}(1 - \frac{3}{ar_e} + \frac{3}{a^2r_e^2}) - \frac{\hbar^2a^2}{2\mu}[\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}} - (n + \frac{1}{2})]^2, \tag{2.49}$$

où

$$\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}} = \frac{1}{a^2\sqrt{\gamma}}[\frac{2\mu D_e}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r_e^2}(\frac{2}{ar_e} - \frac{3}{a^2r_e^2})] \tag{2.50}$$

La dernière équation indique le spectre d'énergie du potentiel Morse. La dérivée de cette expression d'énergie en fonction de n donne une idée sur le maximum du nombre quantique vibrationnel, ainsi le résultat est $n_{\max} = \beta/2\sqrt{\gamma} - 1/2$.

Maitenant, on peut trouver la fonction d'onde correspondante au potentiel de Morse. Un calcul simple révèle que $\phi(z)$ peut être calculée en rappelant l'équation (2.3) et en introduisant $\sigma(z) = z$ et $\pi(z) = -(\sqrt{\gamma}z - \sqrt{\alpha})$

$$\varphi(z) = z^{\sqrt{\gamma}}e^{-\sqrt{\gamma}z} \tag{2.51}$$

qui est l'une des parties séparables de la fonction d'onde $u(z) = \varphi(z)y_n(z)$. La solution polynomiale de la fonction de type hypergéométrique $y_n(z)$ dépend de la détermination de la fonction de poids

$\rho(z)([\sigma(z)\rho(z)]' = \tau(z)\rho(z)$. Ainsi, $\rho(z)$ est calculé comme :

$$\rho(z) = z^{2\sqrt{\alpha}}e^{-2\sqrt{\gamma}z} \tag{2.52}$$

On substitue l'équation (2.52) dans la formule de Rodrigues donnée dans l'équation (2.20), l'autre partie séparable de la fonction d'onde $u(z)$ est donnée sous la forme suivante

$$y_n(z) = B_n z^{-2\sqrt{\alpha}} e^{2\sqrt{\gamma}z} \frac{d^n}{dz^n}[z^{\,(n+2\sqrt{\alpha})} e^{-2\sqrt{\gamma}z}] \tag{2.53}$$

La solution polynomiale de $y_n(z)$ dans l'équation (2.53) est exprimée en termes de polynômes de Laguerre associés, qui un est l'un des polynômes orthogonaux, c'est-à-dire :

$$y_n(z) \equiv L_n^{2\sqrt{\alpha}}(2\sqrt{\gamma}z) \tag{2.54}$$

En combinant les polynômes de Laguerre et $\varphi(z)$ dans l'équation (2.50), la fonction d'onde radiale est construite comme :

$$u(z) = N_{n\ell} z^{\sqrt{\alpha}} e^{-\sqrt{\alpha}z} L_n^{2\sqrt{\alpha}}(2\sqrt{\gamma}z) \tag{2.55}$$

où $N_{n\ell}$ est la constante de normalisation.

2.4.2 Résolution de l'équation de Klein-Gordon pour le champ coulombien

L'équation de Klein-Gordon est une équation qui définit le mouvement d'une particule chargée $-e$ ($e > 0$), de spin entier et de masse M dans un champ coulombien d'énergie potentielle $U(r) = -Ze^2/r$, un tel problème se pose par exemple quand on étudie le mouvement des mésons π dans le champ des noyaux atomiques. Dans un système d'unités ou la masse M, la constante de Planck $\hbar$ et la vitesse de la lumière c sont égales à 1, donc l'équation de Klein-Gordon s'écrit sous la forme:

$$\Delta\psi + [(E + \frac{\mu}{r})^2 - 1]\psi = 0 \qquad \text{avec } \mu = \frac{Ze2}{\hbar c} \approx \frac{Z}{137} \tag{2.56}$$

Pour les états liés on a $0 < E < 1$.

Nous cherchons la solution de l'équation (2.56), par séparation des variables en coordonnées sphériques, en posant $\psi(r) = F(r)Y(\theta, \varphi)$. Nous obtenons les équations suivantes pour les fonctions $F(r)$ et $Y(\theta, \varphi)$

$$\Delta\theta\varphi Y + \lambda Y = 0 \tag{2.57}$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dF}{dr}) + [(E+\frac{\mu}{r})^2 - 1 - \frac{\lambda}{r^2}]F(r) = 0 \tag{2.58}$$

L'équation (2.56) n'admet de solutions bornées et univoques pour $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ que si $\lambda = l(l+1)$, auquel cas $Y(\theta,\varphi) = Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ est une fonction sphérique. L'équation (2.58) se réduit par le changement $R(r) = rF(r)$ à

$$R' + [(E+\frac{\mu}{r})^2 - 1 - \frac{l(l+1)}{r^2}]R = 0 \tag{2.59}$$

On remarque que l'équation(2.59) est une équation généralisée du type hypergéométrique avec $\sigma(r) = r$, $\tilde{\tau}(r) = 0$, $\tilde{\sigma}(r) = (Er+\mu)^2 - r^2 - l(l+1)$.

La fonction $R(r)$ doit vérifier la condition de normalisation

$$\int_0^\infty R^2(r)dr = 1 \tag{2.60}$$

et être bornée pour $r \to 0$. Remarquons qu'en résolvant l'équation de Schrödinger correspondante, on demande que soit bornée pour $r \to 0$ la fonction $\frac{1}{r}R(r)$, ce qui consiste en une condition plus restrictive .

Pour $r \to 0$, l'équation (2.59) admet une singularité pour $r \to 0$. Voyons ce que devient $R(r)$ quand r~ 0. Puisqu'on a pour $r \to 0$

$$(E+\frac{\mu}{r})^2 - 1 - \frac{l(l+1)}{r^2} \approx \frac{\mu^2 - l(l+1)}{r^2} \tag{2.61}$$

Le comportement de la fonction $R(r)$ se définira approximativement dans le voisinage du point $r = 0$ par l'équation d'Euler :

$$R' + \frac{\mu^2 - l(l+1)}{r^2}R = 0 \tag{2.62}$$

dont les solutions se présentent sous la forme

$$R(r) = C_1 r^{\nu+1} + C_2 r^{-\nu-1} \tag{2.63}$$

avec

$$\nu = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 - \mu^2} \tag{2.64}$$

(il sera supposé par la suite que $\mu < l + 1/2$. Comme la fonction $R(r)$ doit rester bornée pour $r \to 0$,on $C_2 = 0$,i.e. $R(r) \approx C_1 r^{\nu+1}$ lorsque $r \to 0$.

En effet, nous avons dans le cas considéré $\tilde{P}(r) = 1/r$, de sorte que la fonction $\sqrt{\tilde{P}(r)}R(r)$ doit rester bornée pour $r \to 0$ et de carré sommable sur l'intervalle $]0, \infty[$ en raison du comportement de $R(r)$ pour $r \to 0$ et conformément à la condition de normalisation de l'équation (2.60).

Ramenons l'équation (2.59) à l'équation hypergéométrique :

$$\sigma(r)y' + \tau(r)y' + \lambda y = 0 \tag{2.65}$$

En posant $R(r) = \varphi(r)y(r)$, avec $\varphi(r)$ représentant la solution de l'équation (2.3), donc le polynôme $\pi(r)$ se définira par l'expression

$$\pi(r) = 1/2 \pm \sqrt{\sqrt{(l+1/2)^2 - \mu^2} - 2\mu E r + (1-E^2)r^2 + kr}. \tag{2.66}$$

La constante K sera choisie de telle façon que l'expression sous le radical admette des racines multiples. Le polynôme $\pi(r)$ se présentera donc sous l'une des formes suivantes :

$$\left.\begin{array}{rl} \pi(r) = 1/2\{\sqrt{1-E^2}r + \nu + \frac{1}{2}\ , & \text{pour } k = 2\mu E + (2\nu+1)\sqrt{1-E^2} \\ \pi(r) = 1/2\{\sqrt{1-E^2}r - \nu - \frac{1}{2} & \text{, pour } k = 2\mu E - (2\nu+1)\sqrt{1-E^2} \end{array}\right\} \tag{2.67}$$

De toute les formes possibles de $\pi(r)$, on doit choisir celle pour laquelle la fonction $\tau(r) = \tilde{\tau}(r) + 2\pi(r)$ a sa racine sur l'intervalle $]0, +\infty[$ et une dérivée négative. Ces conditions seront vérifiées par la fonction $\tau(r) = 2(\nu + 1 - \alpha r)$, avec $\alpha = \sqrt{1-E^2}$, ce qui donne :

$$\begin{aligned} \pi(r) &= \nu + 1 - \alpha r, & \varphi(r) &= r^{\nu+1}e^{-\alpha r} \qquad (2.68) \\ \lambda &= 2(\mu E - (\nu+1)\alpha & , p(r) &= r2^{\nu+1}e^{-2\nu r} \\ \nu &= -\frac{1}{2} + \sqrt{(\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2)}. & & \qquad (2.69) \end{aligned}$$

Les valeurs propres de l'énergie E se cherchent à partir de l'équation (2.18) lorsque $\mu_n = 0$, et

$$E = E_n = \frac{1}{\sqrt{1 + (\frac{\mu}{n+\nu+1})^2}} \quad , \quad \text{avec } n = 0, 1, ... \tag{2.70}$$

Donc, les fonctions propres correspondantes $y = y_n(r)$ se présentent comme suit :

$$y_n(r) = \frac{B_{n\ell}}{r^{2\upsilon+1}e^{-2\alpha r}} \frac{dn}{drn}(r^{n+2\nu+1}e^{-2\alpha r}) \tag{2.71}$$

et se confondent à un facteur près avec les polynômes de Laguerre $L_n^{2\nu+1}(x)$, ou $x = 2\alpha r$.

Les fonctions propres $R(r) = R_{n\ell}(r)$ s'écrivent :

$$R_{n\ell}(r) = C_{n\ell}x^{\nu+1}e^{-x/2}L_n^{2\nu+1}(x) \tag{2.72}$$

On vérifie sans peine que les fonctions $R_{n\ell}(r)$ satisfont à la condition $\int_0^\infty R_{n\ell}^2(r)dr < \infty$ formulée au départ. La constante $C_{n\ell}$ se trouve de la condition de normalisation de l'équation (2.60).

Examinons le passage à la limite non relativiste dans ce cas la constante μ est petite.

Evaluons les autres quantités pour $\mu \to 0$:

$$\nu = l, \quad E = 1 - \frac{\mu^2}{2(n+l+1)^2}, , \alpha = \sqrt{1-E^2} \approx \frac{\mu}{n+l+1}r \tag{2.73}$$

$$R_{n\ell}(r) \approx C_{nl}x^{l+1}e^{-x/2}L_n^{2l+1}(x), \qquad \text{avec } x = \frac{2\mu}{n+l+1}r \tag{2.74}$$

Par conséquence, la quantité μr dans notre système d'unités correspond à Zr dans le système atomique, et l'énergie :

$$E = 1 - \frac{\mu^2}{2(n+l+1)^2}$$

La valeur $E_0 = 1$ représente l'énergie de repos de la particule.

2.4.3 Résolution de l'équation de Dirac pour le champ coulombien

L'équation de Dirac est une équation qui définit le mouvement d'une particule chargée de spin demi-entier et de masse M dans un champ coulombien d'énergie potentielle$U(r) = -Ze^2/r$.

Dans ce cas la fonction d'onde de la particule admet quatre composantes $\psi_k(r)(k = 1, ..., 4)$.

Dans un système d'unités où la masse de la particule M , la constante de Planck $\hbar$ et la vitesse de la lumière c sont égales à 1, donc l'équation de Dirac s'écrira :

$$
\begin{aligned}
i(E+\frac{\mu}{r}+1)\psi_1+\frac{\partial\psi_3}{\partial z}+\frac{\partial\psi_4}{\partial x}-i\frac{\partial\psi_4}{\partial y} &= 0, \\
i(E+\frac{\mu}{r}+1)\psi_2-\frac{\partial\psi_4}{\partial z}+\frac{\partial\psi_3}{\partial x}+i\frac{\partial\psi_3}{\partial y} &= 0, \\
(E+\frac{\mu}{r}-1)\psi_3+\frac{\partial\psi_1}{\partial z}+\frac{\partial\psi_2}{\partial x}-i\frac{\partial\psi_2}{\partial y} &= 0, \\
(E+\frac{\mu}{r}-1)\psi_4-\frac{\partial\psi_2}{\partial z}+\frac{\partial\psi_1}{\partial x}+i\frac{\partial\psi_1}{\partial y} &= 0,
\end{aligned}
\tag{2.75}
$$

Les quantités E et μ gardent le même sens que dans l'équation de Klein-Gordon, où $0 < E < 1$.

Les variables dans l'équation (2.75) en coordonnées sphériques (r, θ, φ) se séparent si l'on veut chercher la solution sous la forme :

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \psi_1(r) \\ \psi_2(r) \end{pmatrix} &= f(r)\Omega_{jlm}(\theta,\varphi) \\
\begin{pmatrix} \psi_1(r) \\ \psi_2(r) \end{pmatrix} &= (-1)^{\frac{\ell-\ell'+1}{2}} g(r)\Omega_{jl'm}(\theta,\varphi)
\end{aligned}
\tag{2.76}
$$

où j représente le nombre quantique caractérisant le moment angulaire total de la particule ($j = 1/2, 3/2, ...$), l et l' sont les nombres quantiques orbitaux qui pour un j donné, peuvent prendre deux valeurs : $j - 1/2$, $j + 1/2$, avec par ailleurs $l' = 2j - l$; le nombre quantique m parcourt les valeurs demi-entières comprises entre $-j$ et j.

Les quantités $\Omega_{jlm}(\theta,\varphi)$ et $\Omega_{jlm}(\theta,\varphi)$ définissent l'influence des variables angulaires sur la fonction d'onde. Ces quantités sont des spineurs sphériques qui sont liées aux fonctions sphériques $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ par les relations suivantes :

$$
\begin{aligned}
\Omega_{jlm} &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+m}{2l+1}}Y_{l,m-1/2}(\theta,\varphi) \\ \sqrt{\frac{j-m}{2l+1}}Y_{l,m+1/2}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} \quad , \qquad \text{pour } l = j - 1/2 \\
\Omega_{jlm} &= \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j-m+1}{2l+1}}Y_{l,m-1/2}(\theta,\varphi) \\ \sqrt{\frac{j-m+1}{2l+1}}Y_{l,m+1/2}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} \quad , \qquad \text{pour } l = j + 1/2
\end{aligned}
\tag{2.77}
$$

pourtant les équations (2.76) dans (2.75), on obtient un système d'équations pour les

fonctions $f(r)$ et $g(r)$:

$$\begin{aligned} f'(r) + \frac{1+x}{r} f - (E + 1 + \frac{\mu}{r}) g &= 0 \\ g' + \frac{1+x}{r} g - (E + 1 + \frac{\mu}{r}) f &= 0 \end{aligned} \tag{2.78}$$

Avec :

$$\begin{aligned} x &= -(l+1) \quad , \quad \text{pour } l = j - 1/2 \\ x &= l \qquad\qquad\quad , \text{ pour } l = j + 1/2 \end{aligned} \tag{2.79}$$

Remarquons que dans l'approximation non relativiste on a $|f(r)| >> |g(r)|$ (se qui sera montré par la suite).

Les conditions définissant les fonctions $f(r)$ et $g(r)$ pour les états du spectre discret se déterminent en imposant que les fonctions $rf(r)$ et $rg(r)$ doivent rester bornées pour $r \to 0$ et vérifier la condition de normalisation :

$$\int_0^\infty r^2 [f^2(r) + g^2(r)] dr = 1. \tag{2.80}$$

Mettons le système d'équation (2.78) sous forme matricielle. soit :

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix}, u' = \begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \end{pmatrix}$$

On a

$$u' = Au, \tag{2.81}$$

avec :

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1+x}{r} & 1 + E + \frac{\mu}{r} \\ 1 - E - \frac{\mu}{r} & -\frac{1-x}{r} \end{pmatrix} \tag{2.82}$$

Pour définir $u_1(r)$, éliminons $u_2(r)$, entre les équations (2.81) ; cela nous donnera une équation différentielle du second ordre pour la fonction $u_1(r)$

$$u'1 = (a_{11} + a_{22} + \frac{a_{12}'}{a_{12}} u_1') + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} - a_{11}' + \frac{a_{12}'}{a_{12}} a_{11}) u_1 = 0 \tag{2.83}$$

D'une façon analogue, en éliminant $u_1(r)$, nous obtenons l'équation pour $u_2(r)$

$$u_2' - (a_{11} + a_{22} + \frac{a_{21}'}{a_{21}})u_2' + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} - a_{22}' + \frac{a_{21}'}{a_{21}}a_{22})u_2 = 0 \tag{2.84}$$

Les coefficients de la matrice A s'écrivent a :

$$a_{ik} = b_{ik} + c_{ik}/r \tag{2.85}$$

ou b_{ik} et c_{ik} sont des constantes, les équations (2.83) et (2.84) ne sont pas des équations généralisées du type hypergéométrique. Cela tient à ce que :

$$\frac{a_{12}'}{a_{12}} = \frac{c_{12}}{c_{12}r + b_{12}r^2} \tag{2.86}$$

ce qui fait que les coefficients affectant $u\prime_1(r)$ et $u_1(r)$ dans l'équation (2.83) s'écrivent :

$$a_{11} + a_{22} + \frac{a_{12}'}{a_{12}} = \frac{p_1(r)}{r} - \frac{c_{12}}{c_{12}r + b_{12}r^2} \tag{2.87}$$

$$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} - a_{11}' + \frac{a_{21}'}{a_{21}}a_{11} = \frac{p_2(r)}{r^2} - \frac{c_{12}}{c_{12}r + b_{12}r^2}\frac{c_{11} + b_{11}r}{r} \tag{2.88}$$

Les polynômes $p_1(r)$ et $p_2(r)$ étant de degrés non supérieurs à 1 et à 2 respectivement. L'équation (2.83) serait une équation généralisée du type hypergéométrique avec $\sigma(r) = r$ si $\{b_{12} = 0, \text{ où } c_{12} = 0\}$.

Il y a donc intérêt à faire les transformations suivantes. Un changement linéaire :

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \tag{2.89}$$

Dans lequel la matrice C non dégénérée ne dépend pas de r , nous donne un système d'équations pour les fonctions $v_1(r)$ et $v_2(r)$ analogue à l'équation (2.78). En effet, on obtient au lieu de l'équation (2.81) :

$$v' = \tilde{A}v \tag{2.90}$$

dans laquelle

$$v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}, \quad \tilde{A} = CAC^{-1} = \begin{pmatrix} \tilde{a}_{11} & \tilde{a}_{12} \\ \tilde{a}_{21} & \tilde{a}_{22} \end{pmatrix} \tag{2.91}$$

Les coefficients $\tilde{a}_{ik}$ représentent évidemment des combinaisons linéaires des a_{ik}. Ils s'écrivent donc :

$$\tilde{a}_{11} = \tilde{b}_{ik} + \tilde{c}_{ik}/r \tag{2.92}$$

Où $\tilde{b}_{ik}$ et $\tilde{c}_{ik}$ sont des constantes.

Les équations définissant les fonctions $\upsilon_1(r)$ et $\upsilon_2(r)$ seront analogues aux équations (2.83) et (2.84) :

$$\upsilon_1' - (\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{22} + \frac{\tilde{a}_{12}'}{\tilde{a}_{12}})\upsilon_1' + (\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{22} - \tilde{a}_{12}\tilde{a}_{21} - \tilde{a}_{11}' + \frac{\tilde{a}_{12}'}{\tilde{a}_{12}}\tilde{a}_{11})\upsilon_1 = 0, \tag{2.93}$$

$$\upsilon_2' - (\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{22} + \frac{\tilde{a}_{21}'}{\tilde{a}_{21}})\upsilon_2' + (\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{22} - \tilde{a}_{12}\tilde{a}_{21} - \tilde{a}_{22}' + \frac{\tilde{a}_{21}'}{\tilde{a}_{21}}\tilde{a}_{22})\upsilon_2 = 0, \tag{2.94}$$

Remarquons que le calcul des coefficients dans les équations (2.93) et (2.94) est facilité par la similitude des matrices A et $\tilde{A}$:

$$\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{22} = a_{11} + a_{22}, \qquad \tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{22} - \tilde{a}_{12}\tilde{a}_{21} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}. \tag{2.95}$$

Pour convertir l'équation (2.93) à une équation généralisée de type hypergéométrique il suffit de poser que $\tilde{b}_{12} = 0$, soit $\tilde{c}_{12} = 0$. Pour l'équation (2.94), la condition est analogue :

soit $\tilde{b}_{21} = 0$, soit $\tilde{c}_{21} = 0$, ces conditions impliquent des restrictions au choix de matrice C .

soit :

$$C = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \tag{2.96}$$

Alors :

$$C^{-1} = \frac{1}{\Delta}\begin{pmatrix} \delta & -\beta \\ -\gamma & \alpha \end{pmatrix},\ \Delta = \alpha\delta - \beta\gamma \tag{2.97}$$

$$\tilde{A} = \frac{1}{\Delta}\begin{pmatrix} a_{11}\alpha\delta - a_{12}\alpha\gamma + a_{21}\beta\delta - a_{22}\beta\gamma & a_{12}\alpha^2 - a_{21}\beta^2 + (a_{22} - a_{11})\alpha\beta \\ a_{21}\delta^2 - a_{12}\gamma^2 + (a_{11} - a_{22})\gamma\delta & -a_{11}\beta\gamma + a_{12}\alpha\gamma - a_{21}\beta\delta + a_{22}\alpha\gamma \end{pmatrix} \tag{2.98}$$

Avec $\tilde{b}_{12} = 0$ on a $(1+E)\alpha^2 - (1+E)\beta^2 + 0$,

$>> \tilde{c}_{12} = 0 >>$ $2x\alpha\beta + \mu(\alpha 2 + \beta 2) = 0$,

$>> \tilde{b}_{21} = 0 >>$ $(1+E)\gamma^2 - (1+E)\delta^2 = 0$,

$>> \tilde{c}_{21} = 0 >>$ $2x\alpha\beta + \mu(\alpha^2 + \beta^2) = 0$,

Nous voyons que les quantités α, β, γ, δ peuvent être choisies de différentes manières. Les auteurs des manuels de mécanique quantique se bornent généralement à examiner une seule variante définie par $\tilde{b}_{12} = 0$, $\tilde{b}_{21} = 0$. Nous allons considérer, à titre d'exemple, le cas ou les constantes α, β, γ, δ sont choisies en posant $\tilde{c}_{12} = 0, \tilde{c}_{21} = 0$ (nous verrons par la suite que ces conditions sont vérifiées si la matrice C se présente sous la forme :

$$C = \begin{pmatrix} \mu & \nu - x \\ \nu - x & \mu \end{pmatrix} \tag{2.99}$$

ou $\nu = \sqrt{x^2 - \mu^2}$. Nous obtenons alors le système d'équations suivant pour les fonctions $\upsilon_1(r)$ et $\upsilon_2(r)$:

$$\upsilon_1' = (-\frac{\nu + 1}{r} + \frac{E\mu}{\nu})\upsilon_1 + (1 + \frac{Ex}{\nu})\upsilon_2 \tag{2.100}$$

$$\upsilon_2' = (1 - \frac{Ex}{\nu})\upsilon_1 + (\frac{\nu - 1}{r} + \frac{E\mu}{\nu})\upsilon_2 \tag{2.101}$$

Si $1 + \frac{Ex}{\nu} \neq 0$, on peut éliminer entre les équations (2.100) et (2.101) la fonction $\upsilon_2(r)$ pour obtenir l'équation différentielle relative à la fonction $\upsilon_1(r)$:

$$\upsilon_1'' + \frac{2}{r}\upsilon_1' + \frac{(E^2 - 1)r^2 + 2E\mu r - \nu(\nu + 1)}{r^2}\upsilon_1 \tag{2.102}$$

Soit maintenant $1 + \frac{Ex}{\nu} = 0$, i. e. $E = -\nu/x$. ce qui ne peut avoir lieu qu'avec $x < 0$, car $\nu > 0$ et $E > 0$. La solution de (2.100) se présente alors sous la forme :

$$\upsilon_1(r) = C_1 r^{-\nu-1} e^{\frac{Ex}{\nu}r} \tag{2.103}$$

La fonction $\upsilon_1(r)$ ne peut servir de solution qu'avec $C_1 = 0$, auquel cas la fonction $\upsilon_2(r)$définit par l'équation (2.101) s'écrira :

$$\upsilon_2(r) = C_2 r^{-\nu-1} e^{\frac{Ex}{\nu}r} \tag{2.104}$$

Pour $C_2 \neq 0$, la fonction $\upsilon_2(r)$ peut évidemment servir de solution.

Etudions maintenant la solution de l'équation (2.102). Voyons ce que devient la fonction $\upsilon_1(r)$ pour $r \to 0$. Puisque :

$$\left|(E^2 - 1)r^2 + 2E\mu r\right| << \nu(\nu + 1). \tag{2.105}$$

Pour $r \to 0$ le comportement de $\upsilon_1(r)$ dans le voisinage du point $r = 0$ se définira approximativement par l'équation d'Euler :

$$r^2\upsilon_1'' + 2r\upsilon_1' - \nu(\nu+1)\upsilon_1 = 0, \tag{2.106}$$

qui a pour solution

$$\upsilon_1(r) = C_1 r^{\nu} C_2 r^{-\nu-1} \tag{2.107}$$

Les conditions imposées à $\upsilon_1(r)$ impliquent $C_2 = 0$. pour r ~ 0, on a donc $\upsilon_1(r) \approx C_1 r^{\nu}$.

L'équation (2.102) est une équation généralisée du type hypergéométrique avec $\sigma(r) = r$, $\tilde{\tau}(r) = 2$, $\tilde{\sigma}(r) = (E^2-1)r^2 + 2E\mu r - \nu(\nu+1)$.

En effet, on a dans le cas considéré $\tilde{p}(r) = r$, La fonction $\sqrt{\tilde{p}(r)}\upsilon_1(r)$ doit être de carré intégrable sur l'intervalle $]0,\infty[$ et rester bornée pour $r \to 0$, en raison de la condition de normalisation de l'équation (2.80) et du comportement de $\upsilon_1(r)$ pour $r \to 0$.

Réduisons l'équation (2.102) à l'équation du type hypergéométrique :

$$\sigma(r)y' + \tau(r)y' + \lambda y = 0 \tag{2.108}$$

Par le changement $\upsilon_1 = \varphi(r)y$, ou $\varphi(r)$ vérifie l'équation :

$$\varphi'/\varphi = \pi(r)/p(r) \tag{2.109}$$

Les quatre formes possibles du polynôme $\pi(r)$, nous choisirons celle pour laquelle la fonction $\tau(r) = \tau(r) + 2\pi(r)$ a sa racine sur l'intervalle $]0,\infty[$ et une dérivée négative. Ces conditions seront vérifiées par la fonction $\tau(r) = 2(\nu + 1 - ar)$, où $a = \sqrt{1-E^2}$,

$$\begin{aligned} \pi(r) &= \nu - ar; \qquad \varphi(r) = r^{\nu}e^{-ar}; \\ \lambda &= 2[2E - (\nu+1)a]; \qquad p(r) = r^{2\nu+1}e^{-ar} \\ \nu &= \sqrt{x^2-\mu^2} \end{aligned} \tag{2.110}$$

Les valeurs de l'énergie $E = E_n$ se déduisent de l'équation :

$$\lambda + n\tau' + \frac{1}{2}n(n-1)\sigma' = 0 \qquad (\ n = 0,\ 1,\ 2), \tag{2.111}$$

d'où

$$\mu E - (n + \nu + 1)a = 0 \quad (a = \sqrt{1 - E^2}) \tag{2.112}$$

et les fonctions propres, de la formule de Rodrigues

$$y_n(r) = \frac{C_n}{p(r)} \frac{d^n}{dr^n}[\sigma^n(r)p(r)] = C_n r^{-2\nu-1} e^{2ar} \frac{dn}{dr^n}(r^{n+2\nu+1} e^{-2ar}) \tag{2.113}$$

Les fonctions $y_n(r)$ se confondent, à un coefficient de proportionnalité près, avec les polynômes de Laguerre $L_n^{2\nu+1}(x)$.ou $x = 2ar$.

La valeur propre de l'énergie $E = -\nu/x$ obtenue précédemment vérifie l'équation (2.112) pour $n = -1$. Il est donc naturel de remplacer n par $n - 1$, dans les formules les équations (2.112), (2.113) et de chercher les valeurs propres de l'énergie à partir de l'égalité :

$$\mu E - (n + \nu)a = 0 \qquad (n = 0,\ 1,\ ....) \tag{2.114}$$

Les fonctions propres $\upsilon_1(r)$ s'écriront sous la forme :

$$\upsilon_1(r) = \begin{cases} A_n x^\nu e^{-x/2} L_{n-1}^{2\nu+1}(x) & \text{pour } n = 1,\ 2,\ ..... \\ 0 & \text{pour } n = 0. \end{cases} \tag{2.115}$$

Il est facile de s'assurer que les fonctions $r\upsilon_1(r)$ sont de carré intégrable, comme exigé initialement

De l'équation (2.100) on déduit pour$E = E_n$ $(n = 1,\ 2,\ ....)$

$$\upsilon_2(r) = \frac{1}{1 + \frac{Ex}{\nu}}[\upsilon_1'(r) + (\frac{\nu + 1}{r} - \frac{E\mu}{\nu})\upsilon_1(r)] \tag{2.116}$$

Portant dans cette formule l'expression de $\upsilon_1(r)$, on obtient :

$$\upsilon_2(r) = x^{-\nu-1} e^{-x/2} y(x) \tag{2.117}$$

ou $y(x)$ est un polynôme de degré n, Pour définir $y(x)$, établissons d'abord l'équation pour $\upsilon_2(r)$ en éliminant $\upsilon_1(r)$ entre les équations (2.100) et (2.101) :

$$\upsilon_2'' + \frac{2}{r}\upsilon_2' + \frac{(E^2 - 1)r^2 + 2E\mu r + \nu(1 - \nu)}{r^2}\upsilon_2 = 0 \tag{2.118}$$

qui nous conduira à l'équation différentielle pour $y(x)$:

$$xy'' + (2\nu - x)y' + ny = 0. \tag{2.119}$$

L'équation (2.119) est une équation de type hypergéométrique. Sa seule solution polynomiale est le polynôme de Laguerre $y(x) = B_n L_n^{2\nu-1}(x)$,d'où

$$\upsilon_2(r) = B_n x^{\nu-1} e^{-x/2} L_n^{2\nu-1}(x) \tag{2.120}$$

On s'assure sans difficulté que cette formule renferme, comme cas particulier pour $n = 0$, la solution précédemment obtenue pour $E = -\nu/x$.

Pour établir la relation entre les constantes A_n et B_n dans les équations (2.115) et (2.120), confrontons le comportement du premier et du second membres de l'égalité l'équation (2.100) pour r$\rightarrow$ 0. Utilisons la formule :

$$L_n^{\alpha}(0) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!\Gamma(\alpha + 1)} \tag{2.121}$$

on trouve :

$$2a\nu A_n L_{n-1}^{2\nu+1}(0) = -2a(\nu + 1)A_n L_{n-1}^{2\nu+1}(0) + (1 + \frac{Ex}{\nu})B_n L_n^{2\nu-1}(0), \tag{2.122}$$

d'où

$$A_n = \frac{\nu + Ex}{a_n(n + 2\nu)} B_n \qquad (n = 1, 2, ...) \tag{2.123}$$

Puisque

$$n(n + 2\nu) = (n + \nu)^2 - \nu^2 = \frac{E^2\mu^2}{a^2} - \nu^2 = \frac{E^2x^2 - \nu^2}{a^2} \tag{2.124}$$

on a

$$A_n = \frac{a}{Ex - \nu} B_n \tag{2.125}$$

Connaissant les fonctions $\upsilon_1(r)$ et $\upsilon_2(r)$, on cherche $f(r)$ et $g(r)$:

$$\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = C^{-1} \begin{pmatrix} \upsilon_1 \\ \upsilon_2 \end{pmatrix} \; ; C^{-1} = \frac{1}{2\nu(x - \nu)} \begin{pmatrix} \mu & x - \nu \\ x - \nu & \mu \end{pmatrix} \tag{2.126}$$

Aussi

$$
\begin{aligned}
f(r) &= \frac{B_n}{2\nu(x-\nu)} x^{\nu-1} e^{-x/2} [f_1 x L_{n-1}^{2\nu+1}(x) + f_2 L_n^{2\nu-1}(x)], \\
g(r) &= \frac{B_n}{2\nu(x-\nu)} x^{\nu-1} e^{-x/2} [g_1 x L_{n-1}^{2\nu+1}(x) + g_2 L_n^{2\nu-1}(x)],
\end{aligned}
\tag{2.127}
$$

où

$$
\begin{aligned}
f_1 &= \frac{a\mu}{Ex-\nu}, \quad f_2 = x-\nu, \quad g_1 = \frac{a(x-\nu)}{Ex-\nu}, \quad g_2 = \mu; \\
a &= \sqrt{1-E^2,} \qquad E = E_n = \frac{1}{\sqrt{1+(\frac{\mu}{n+\nu})^2}},
\end{aligned}
\tag{2.128}
$$

Les formules de $f(r)$ et de $g(r)$ restent valables aussi pour $n = 0$, auquel cas il convient d'annuler formellement les termes en $L_{n-1}^{2\nu-1}(x)$.

Calculons le coefficient de normalisation l'équation (2.80). On a

$$
\begin{aligned}
\int_0^\infty r^2 [f^2(r) + g^2(r)] dr &= \frac{B_n^2}{4\nu^2(x-\nu)^2(2a)^3} \int_0^\infty e^{-x} x^{2\nu} \\
&\quad \{[f_1 x L_{n-1}^{2\nu+1}(x) + f_2 L_n^{2\nu-1}(x)]^2 \\
+ \ [g_1 x L_{n-1}^{2\nu+1}(x) + g_2 L_n^{2\nu-1}(x)]^2\} dx &= 1.
\end{aligned}
$$

Dans nos calculs, nous serons amenés à considérer deux types d'intégrables :

$$
\begin{aligned}
J_1 &= \int_0^\infty e^{-x} x^{a+1} [L_n^a(x)]^2 dx, \\
J_2 &= \int_0^\infty e^{-x} x^a [L_{n-1}^a(x)]^2 dx
\end{aligned}
\tag{2.129}
$$

L'intégrale J_1 se laisse exprimer à l'aide du carré de la norme :

$$
d_n^2 = \int_0^\infty e^{-x} x^a [L_n^a(x)]^2 dx = \frac{1}{n!\Gamma(n+\alpha+1)}
\tag{2.130}
$$

en faisant intervenir la relation de récurrence

$$
x L_n^a(x) = -(n+1) L_{n+1}^a(x) + (2n+\alpha+1) L_n^a(x) - (n+a) L_{n-1}^a(x)
\tag{2.131}
$$

et la propriété d'orthogonalité

$$\int_0^\infty e^{-x}x^a L_n^a(x)L_m^a(x) \qquad ,(m \neq n) \tag{2.132}$$

D'où

$$J_1 = (2n+a+1)\int_0^\infty e^{-x}x^a[L_n^a(x)]^2dx = \frac{1}{n!}(2n+a+1)\Gamma(n+a+1). \tag{2.133}$$

pour calculer l'intégrale J_2, il suffit de développer le polynôme $L_n^{a-2}(x)$ suivant les polynômes $L_k^a(x)$:

$$L_n^{a-2}(x) = c_1 L_n^a(x) + c_2 L_{n-1}^a(x) + ... \tag{2.134}$$

Les coefficients c_1, c_2 s'obtient sans peine en identifiant les coefficients de x^ν et de x^{n-1}dans les deux membres de cette égalité :

$$c_1 = 1, \qquad\qquad c_2 = -2 \tag{2.135}$$

Il vient alors

$$J_2 = -\int_0^\infty e^{-x}x^a[L_{n-1}^a(x)]^2dx = -2\frac{\Gamma(n+a)}{(n-1)!} \tag{2.136}$$

Aussi

$$B_n = 2a^2\sqrt{\frac{(x-\nu)(Ex-\nu)!}{\mu\Gamma(n+2\nu)}} \tag{2.137}$$

Remarquons que le facteur de normalisation B_n conserve sa forme aussi pour $n = 0$. Il vient finalement

$$\begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix} = \frac{a^2}{\nu}\sqrt{\frac{(Ex-\nu)n!}{\mu(x-\nu)\Gamma(n+2\nu)}}x^{\nu-1}e^{-x/2}\begin{pmatrix} f_1 & f_2 \\ g_1 & g_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} xL_{n-1}^{2\nu+1}(x) \\ xL_n^{2\nu-1}(x) \end{pmatrix} \tag{2.138}$$

où

$$f_1 = \frac{a\mu}{Ex-\nu}, \quad f_2 = x-\nu, \quad g_1 = \frac{a(x-\nu)}{Ex-\nu}, \quad g_2 = \mu \tag{2.139}$$

Pour $n = 0$ on admet que $xL_{n-1}^{2\nu+1}(x) = 0$.

Considérons le passage à la limite non relativiste. Dans ce cas $\mu \approx Z/137$ est une quantité trés faible. Evaluons les ordres de petitesse des autres quantités pour $\mu \to 0$. On a

$$\begin{aligned} E &\approx 1-\mu^2/((2N^2) \quad , \qquad (N=n+\nu) \\ a &= \sqrt{1-E^2} \approx \mu/N, \quad \nu-|x| \approx -\mu^2/(2\,|x| \end{aligned} \tag{2.140}$$

Evaluons à présent l'ordre de petitesse des coefficients f_1, f_2 et g_1, g_2 devant μ.

1) Soit $l = j - 1/2$. On alors l'ordre $x = -(l+1)$, $x - \nu \approx 2x$, $Ex - \nu \approx 2x$, donc :

$$\begin{pmatrix} f_1 & f_2 \\ g_1 & g_2 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} \mu^2 & 1 \\ \mu & \mu \end{pmatrix} \tag{2.141}$$

2) Soit $l = j+1/2$. On alors $x = l$, $x-\nu \approx \frac{1}{2l}\mu^2$, $Ex-\nu \approx (E-1)x+(x-\nu) \approx \frac{\mu^2}{2!N^2}(N^2-l^2)$, d'où :

$$\begin{pmatrix} f_1 & f_2 \\ g_1 & g_2 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & \mu^2 \\ \mu & \mu \end{pmatrix} \tag{2.142}$$

On voit d'ici que$|g(r) << |f(r)|$ dans tout les cas, tandis que :

$$f(r) = \pm 2\mu 3/2 \sqrt{\frac{(N-l-1)!}{(N+l)!}} x^l e^{-x/\nu} L_{N-l-1}^{2l+1}(x) \tag{2.143}$$

Le signe positif correspond à $l = j + 1/2$, et le signe négatif $l = j - 1/2$. Le nombre $N = n + \nu$ est égal dans le cas non relativiste à $n + |x| = n + |j + 1/2|$; il correspond au nombre quantique principal pour les solutions de l'équation de Schrödinger.

Il est intéressant de noter qu'en mettant les fonctions $f(r)$, $g(r)$ sous de l'équation (2.138), nous facilitons considérablement le passage à la limite non relativiste, car, $\mu \to 0$, l'un des coefficients f_1, f_2, g_1, g_2 tend brusquement vers zéro par rapport au trois autres.

Au contraire, dans la littérature existante, les fonctions $f(r)$, $g(r)$ sont traditionnellement représentées avec des coefficients de même ordre de petitesse. On est donc amené, afin d'établir la correspondance entre la solution de l'équation de Schrödinger et la limite non relativiste, à faire intervenir accessoirement les relations de récurrences pour les fonctions hypergéométriques.

Les polynômes de laguerre figurant dans les expressions de $f(r)$ et $g(r)$ se laisse définir à l'aide des fonctions hypergéométriques dégénérées, en appliquant la relation connue :

$$L_n^a(x) = \frac{\Gamma(n+a+1)}{n!(a+1)} F(-n, a+1, x). \tag{2.144}$$

La représentation de l'équation (2.138). devient alors :

$$\begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix} = D_n x^{\nu-1} e^{-x/2} \begin{pmatrix} \bar{f}_1 & \bar{f}_2 \\ \bar{g}_1 & \bar{g}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} xF(-n+1, 2\nu+2, x) \\ F(-n, 2\nu, x) \end{pmatrix} \tag{2.145}$$

où

$$D_n = \frac{1}{\nu\Gamma(2\nu+2)} \sqrt{\frac{(Ex-\nu)\Gamma(n+2\nu)}{\mu(x-\nu)n!}}, \tag{2.146}$$

$$\bar{f}_1 = a\mu(Ex+\nu), \qquad \bar{f}_2 = 2\nu a^2(2\nu+1)(x-\nu), \tag{2.147}$$

$$\bar{g}_1 = a(x-\nu)(Ex+\nu), \qquad \bar{g}_2 = 2\mu\nu a^2(2\nu-1) \tag{2.148}$$

Les expressions ainsi obtenus de $f(r)$ et $g(r)$ restent aussi vraies, à un facteur de normalisation près, pour les valeurs du spectre continu, à condition de prendre, au lieu des n entiers, une constante $n = n(E)$ liée à la valeurs donnée de E par la relation de l'équation (2.114), i. e .

$$n = \frac{\mu}{i\sqrt{E2-1}} - \nu, E > 1. \tag{2.149}$$

Nous venons d'examiner quelques problèmes fondamentaux de mécanique quantique. Bon nombre de problèmes modèles de mécanique quantique se laissent résoudre par les mêmes méthodes.

Chapitre 3

Résolution de l'équation de Schrödinger généralisée à des systèmes à masses dépendant de la position

3.1 Introduction

Au cours des dernières années, les effets de la masse dépendant de la position (PDM) sur les solutions des équations d'ondes non relativistes et relativistes ont été attirés beaucoup d'intérêt. Il existe une grande variété de situations dans lesquelles PDM est pertinente. Ce sujet a de larges applications en physique des matériaux en général, et en particulier en physique de la matière condensée, pour l'étude des propriétés électroniques des semiconducteurs et des points quantiques, les liquides quantiques ($_3He$) ...etc. C'est ce qui a conduit certains chercheurs à traiter l'équation de Schrödinger avec une masse effective dépendant de la position et pour certaines formes de potentiels physiques. Dans ce qui suit, la généralisation paramétrique de la méthode NU combinée au schéma d'approximation de Pekeris est employée pour résoudre l'équation de Schrödinger PDM pour le potentiel de Morse et de Morse déformé en q avec un nombre quantique angulaire de rotation arbitraire, où l'oscillateur de Morse peut être résolu exactement à l'aide d' une variété de méthodes algébriques.

3.1.1 Cas d'un potentiel de Morse

Comme il a été défini précédemment dans le deuxième chapitre, le potentiel de Morse classique pour des molécules diatomiques [29] s'écrit :

$$V(r) = V_1 e^{-2b(r-r_e)} - V_2 e^{-2b(r-r_e)} \tag{3.1}$$

où $V_1 = D_e$ et $V_2 = 2D_e$ sont deux paramètres positifs qui déterminent l'amplitude du potentiel, et l'hamiltonien de von Roos par l'expression :

$$\begin{aligned} H \quad = \quad & \frac{1}{(\alpha+1)} < \alpha \left[m^{-1}(\overrightarrow{r})\widehat{p}^2 + \widehat{p}^2 m^{-1}(\overrightarrow{r}) \right] + m^{\alpha}(\overrightarrow{r})\widehat{p}m^{\beta}(\overrightarrow{r})\widehat{p}m^{\gamma}(\overrightarrow{r}) + \\ & m^{\gamma}(\overrightarrow{r})\widehat{p}m^{\beta}(\overrightarrow{r})\widehat{p}m^{\alpha}(\overrightarrow{r}) > \quad , \qquad \text{avec } \alpha+\beta+\gamma = -1. \end{aligned} \tag{3.2}$$

En utilisant les propriétés des commutateurs canoniques, afin d'obtenir l'hamiltonian effectif suivant :

$$H = \frac{1}{2m}\widehat{p}^2 + \frac{i\hbar}{2}\frac{m'}{m^2}\widehat{p} + U_{\alpha\beta\gamma}(r) \tag{3.3}$$

$$U_{\alpha\beta\gamma} = \frac{\hbar^2}{4m^3(a+1)}[(\alpha+\gamma-a)\,mm'' + 2(a-\alpha-\gamma-\alpha\gamma)\,m'^2] \tag{3.4}$$

Où $m = m(r)$ est une fonction de masse réelle et m' désigne la différenciation par rapport à r.

Le dernier terme du potentiel peut être éliminé, lorsqu'on applique les contraintes sur les paramètres d'ambiguïté suivantes : $\alpha+\beta+\gamma = 0$, $a-\alpha-\gamma-a\gamma = 0$ qui ont deux solutions possibles $\alpha = 0$ et $a = \gamma$. Dans ce cas, l'équation de Schrödinger ne dépendra pas des paramètres d'ambiguïté mais contiendra un terme contenant une dérivée première de la fonction masse.

L'équation de Schrödinger pour un potentiel radial s'écrit comme suit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{d\psi^2(r)}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) - \frac{m'}{m}\frac{d\psi(r)}{dr}\right] + [V(r) + U_{\alpha\beta\gamma}(r) - E]\,\psi(r) = 0 \tag{3.5}$$

Pour éliminer la première dérivée de l'équation (3.5), une méthode basée sur la technique des transformations canoniques ponctuelles (PCT) est utilisée. Elle transforme l'équation

de Schrödinger ordinaire avec masse constante en une équation avec masse variable. Cette procédure a été utilisée pour obtenir des solutions pour quelques potentiels particuliers. Pour cela, il suffit de transformer la fonction d'onde en

$$\psi(r) = \sqrt{m}\varphi(r)$$

L'équation (3.5), prend la forme d'une équation différentielle de :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d\varphi^2(r)}{dr^2} + (U_{eff}(r) - E)\,\varphi(r) = 0 \tag{3.6}$$

Avec le potentiel effectif :

$$U_{eff}(r) = V_1 e^{-2b(r-r_e)} - V_2 e^{-b(r-r_e)} + U_{\alpha\beta\gamma a}(r) + \frac{\hbar^2}{4m}\left[\frac{3}{2}\left(\frac{m'}{m}\right) - \frac{m''}{m}\right] + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \tag{3.7}$$

Où $r \in [0, \infty]$, et $\varphi(0) = \varphi(\infty) = 0$.

Le modèle analytiquement résoluble est pris en compte où la masse effective est prise sous la forme :

$$m(r) = m_0(1 - \varepsilon e^{-b(r-re)})^{-2}, m(\infty) = m_0 \tag{3.8}$$

Avec $0 < \varepsilon < 1$ est un paramètre constant de couplage.

La fonction de masse ci-dessous

$$m(r) = m_0(1 - \varepsilon_0 e^{-br})^{-2}, \varepsilon_0 = \varepsilon e^{br_e} \begin{cases} \text{converge} & , \quad m(r) \to m_0 \quad \text{si} \quad r \to \infty \\ 0 & , \quad m(r) = m_0(1-\varepsilon_0)^{-2} \text{ si } \quad r \to 0. \end{cases} \tag{3.9}$$

Cependant, dans le choix actuel des fonctions de masse, lorsque $\varepsilon \to 0$, il n'y a pas de perte de généralité.

Il y' a un autre choix de fonctions de masse qui peut être fait et qui a bien fonctionné pour le potentiel de Morse. Il est également intéressant d'observer que certains auteurs ont utilisé une forme différente pour la fonction de masse, i.e. $m(x) = m_0 + m_1 e^{(-\beta x)} + m_2 e^{(-2\beta x)}$ qui est obtenue à partir de la solution de l'équation de Dirac pour le potentiel de Morse et peut être facilement réduite à la masse constante lorsque :

$$\begin{cases} m_1 = m_2 = 0, \\ \text{et} \quad \text{convergent à } \ m_0 \text{ si x} \to \infty \end{cases}$$

D'autre part, pour étudier l'évolution temporelle d'une paquet d'onde libre à l'intérieur d'un puits de potentiel infini où la masse dépend de la position, Schmidt [30] a sélectionné trois cas particuliers pour la fonction de masse $m(x) = cx^{\alpha}$,

$$\text{avec : } \begin{cases} c = 1 \\ \alpha = 1.2 \text{ et } 4 \end{cases}$$

Maintenant, le potentiel de l'oscillateur de Morse est pris en considération avec un nombre quantique angulaire non nul et la généralisation paramétrique de la méthode NU est appliquée pour calculer le spectre d'énergie et la fonction d'onde correspondants. Le potentiel de l'oscillateur de Morse avec $\ell \neq 0$ n'est pas exactement résoluble, donc les résultats numériques ne peuvent pas être vérifiés par des résultats exacts. Cependant, de nombreux résultats obtenus par des méthodes numériques et par des méthodes perturbatives ont été publiés ces dernières années. L'approximation la plus utilisée a été conçue par Pekeris qui est basée sur le développement du terme centrifuge $\ell(\ell+1)r^{-2}$ en une série de termes exponentiels autour de la position d'équilibre internucléaire $r = r_e$ $(x = 0)$ du potentiel de l'oscillateur de Morse jusqu'au deuxième ordre r/r_e. i.e. (à faible excitation d'énergie, où $r = r_e$). L'approximation de Pekeris est principalement fondée sur le développement des puissances de fonctions exponentielles et tronquée au terme quartique. Elle est efficace uniquement pour approcher les états d'énergie de rotation peu excités, mais elle devient inappropriée dans la description des états d'énergie de rotation fortement excités à cause des grandes distances interatomiques.

Pour appliquer l'approximation de Pekeris, les paramètres et les coordonnées sont transformés comme suit :

$$V_{rot}(\varkappa) = \frac{\ell(\ell+1)}{r_e^2}(D_0 + D_1 e^{-v\varkappa} + D_2 e^{-2v\varkappa}), \varkappa \in (0, \infty) \tag{3.10}$$

où

$$\begin{cases} D_0 = 1 - \frac{3}{v} + \frac{3}{v^2}, \\ D_1 = \frac{4}{v} - \frac{6}{v^2}, \\ D_2 = -\frac{1}{v} + \frac{3}{v^2} \end{cases} \tag{3.11}$$

L'équation (3.6) est réécrite plus explicitement comme :

$$\frac{(1-\varepsilon e^{-v\varkappa})^2}{r_e^2}\frac{d^2\varphi(\varkappa)}{dx^2}-\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_{eff}(\varkappa)-E)\varphi(\varkappa)=0 \tag{3.12}$$

Où $\varphi(x)=\varphi(r)$ et les identifications suivantes :

$$U_{eff}(\varkappa)=-\frac{\hbar^2}{2m_0r_e^2}(-a_0+a_1e^{-v\varkappa}-a_2e^{-2v\varkappa}) \tag{3.13}$$

$$\begin{aligned} a_0 &= \ell(\ell+1)D_0, \qquad (3.14)\\ a_1 &= -\ell(\ell+1)D_1+\frac{2m_0r_e^2}{\hbar^2}V_2+V^2r_e^2\left(\frac{\alpha+\gamma+1}{a+1}\right)\varepsilon,\\ a_2 &= \ell(\ell+1)D_2+\frac{2m_0r_e^2}{\hbar^2}V_1+V^2r_e^2\left(\frac{1+2\alpha+2\gamma+4\alpha\gamma-a}{a+1}\right)\varepsilon \end{aligned}$$

Un autre changement de variable $z=e^{-vx}\in[0,1]$ est effectué, suivi d'un petit calcul algébrique simple, afin de réduire l'équation (3.13) à l'aide de l'équation (3.15) en une équation de type hypergéométrique sous la forme :

$$\varphi"(z)+\frac{(1-\varepsilon z)}{z\,(1-\varepsilon z)}\varphi'(z)+\frac{1}{z^2\,(1-z\varepsilon)^2}(-\gamma_1z^2+\gamma_2z-\varepsilon_{nl}^2)\varphi(z)=0 \tag{3.15}$$

Où $\varphi(z)=\varphi(x)$ et

$$\varepsilon_{nl}^2=-\frac{2m_0r_e^2}{\hbar^2b^2}E+\frac{\ell(\ell+1)}{b^2r_e^2}D_0, \tag{3.16}$$

$$\gamma_1=\frac{2m_0r_e^2}{\hbar^2\beta^2}V_1+\frac{\ell(\ell+1)}{\beta^2}D_2+\left(\frac{1+2\alpha+2\gamma+4\alpha\gamma-a}{a+1}\right)r_e^2\varepsilon, \tag{3.17}$$

$$\gamma_2=\frac{2m_0r_e^2}{\hbar^2\beta^2}V_2-\frac{\ell(\ell+1)}{\beta^2}D_1+r_e^2\left(\frac{\alpha+\gamma+1}{a+1}\right)\varepsilon. \tag{3.18}$$

La comparaison de l'équation (3.15) avec l'équation (3.1), et l'application de la généralisation paramétrique du NU introduite dans l'Annexe A, donne les valeurs suivantes pour l'ensemble des polynômes et des constantes :

$$\begin{aligned} \widetilde{\tau}(z) &= 1-\varepsilon z, \sigma(z)=z(1-\varepsilon z), \qquad (3.19)\\ \widetilde{\sigma}(z) &= -\gamma_1z^2+\gamma_2z-\varepsilon_{n\ell}^2 \qquad (3.20) \end{aligned}$$

$$c_1 = 1, \quad c_2 = c_3 = \varepsilon, \quad c_4 = 0, \quad c_5 = -\frac{\varepsilon}{2}, \tag{3.21}$$

$$c_6 = \gamma_1 + \frac{\varepsilon^2}{2}, \quad c_7 = -\gamma_2, \; c_8 = \varepsilon_{n\ell}^2, \quad c_9 = \frac{\varepsilon^2}{4}\left[1 + 4\varepsilon_{n\ell}^2 + \frac{4}{\varepsilon}\left(\frac{\gamma_1}{\varepsilon} - \gamma_2\right)\right], \tag{3.22}$$

$$c_{10} = 2\varepsilon_{nl} \;, \quad c_{11} = S = \sqrt{1 + 4\varepsilon_{n\ell}^2 + \frac{4}{\varepsilon}\left(\frac{\gamma_1}{\varepsilon} - \gamma_2\right)},$$

$$c_{12} = \varepsilon_{n\ell}, \quad c_{13} = \frac{1}{2}\left(1 + S\right),$$

$$A = \gamma_1, \quad B = \gamma_2, \quad C = \varepsilon_{nl}^2 \tag{3.23}$$

De plus, l'application des relations (A1-A4) de l'annexe A avec les valeurs des constantes ci-dessus donne les valeurs particulières suivantes pour les fonctions essentielles :

$$\pi(z) = \varepsilon_{n\ell} - \frac{\varepsilon}{2}\left(1 + 2\varepsilon_{n\ell} + S\right) z, \tag{3.24}$$

$$k = \gamma_2 + 2\varepsilon\varepsilon_{n\ell}^2 - \varepsilon\varepsilon_{n\ell} S \tag{3.25}$$

et

$$\tau(z) = 1 + 2\varepsilon_{n\ell} - \varepsilon\left(2 + 2\varepsilon_{n\ell+S}\right) z \tag{3.26}$$

Où $\tau'(z) = -\varepsilon\left(2 + \varepsilon_{nl} + S\right) < 0$. D'autre part, en appliquant la relation $(A5)$, l'équation d'énergie pour le potentiel de Morse qui est présentée dans l'équation (3.1) peut être trouvée comme :

$$\varepsilon_{n\ell} = \frac{n\left(n+1\right)\varepsilon - \left(2n+1\right)\sqrt{\gamma_1} + \gamma_2}{2\sqrt{\gamma_1} - \left(2n+1\right)\varepsilon}, \qquad 0 \leq n \leq n_{\max} \tag{3.27}$$

Où n est le nombre quantique de vibration et n_{max} désigne le nombre maximum d'états liés où il y a changement de signe. L'équation ci-dessus peut être exprimée alternativement comme :

$$\begin{aligned} E_{n\ell} &= B_0\left(1 - \frac{3}{br_e} + \frac{3}{b2r_e^2}\right) - A_0\left[Q_2 - \sqrt{A_0}\left(n + \frac{1}{2}\right)\varepsilon\right]^{-2} \\ &\times\left\{\frac{1}{2}\sqrt{A_0}\left[\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{1}{4}\right]\varepsilon + \sqrt{\frac{1}{A_0}}Q_1 - \left(n + \frac{1}{2}\right)Q_2\right\}^2 \end{aligned} \tag{3.28}$$

Avec $A_0 = \hbar^2 b^2/(2m_0)$et $B_0 = \hbar^2 \ell(\ell+1)/(2m_0 r_e^2)$.

Q_1 et Q_2 sont exprimés en termes de paramètres d'ambigüité α, γ et a est une constante de couplage avec la masse comme :

$$\begin{aligned} Q_1 &= D_e - B_0\left(\frac{2}{br_e} - \frac{3}{b^2 r_e^2}\right) + \frac{r_e^2 A_0}{2}\left(\frac{\alpha+\gamma+1}{a+1}\right)\varepsilon, \\ Q_2 &= \sqrt{D_e - B_0\left(\frac{1}{br_e} - \frac{3}{b^2 r_e^2}\right) + r_e^2 A_0\left(\frac{1+2\alpha+2\gamma+4\alpha\gamma-\alpha}{a+1}\right)\varepsilon^2} \end{aligned} \tag{3.29}$$

Où $\ell = 0, 1, 2, ...$,signifie le nombre quantique de rotation. En effet, l'expression d'énergie dans (3.28) est la forme la plus générale valable pour tout choix de l'ordre des paramètres. Il convient de noter que les résultats de la Ref. [29] peuvent être facilement retrouvés lorsque les valeurs des paramètres d'ambigüité prennent les valeurs $a = 1$ et $\alpha = 0 = \gamma$. Pour les ondes s ($\ell = 0$), les états d'énergie de vibration deviennent :

$$E_{n\ell} = -A_0\left[q_2 - \sqrt{A_0}\left(n+\frac{1}{2}\right)\varepsilon\right]^{-2}\left\{\frac{1}{2}\sqrt{A_0}\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 - \frac{1}{4}\right]\varepsilon + \sqrt{\frac{1}{A_0}}q_1 - \left(n+\frac{1}{2}\right)q_2\right\}^2, \quad n = 0, \tag{3.30}$$

Où les paramètres q_1 et q_2 sont exprimés en termes des paramètres généraux d'ambigüité comme :

$$\begin{aligned} q_1 &= D_e + \frac{r_e^2 A_0}{2}\left(\frac{\alpha+\gamma+1}{a+1}\right)\varepsilon \\ q_2 &= \sqrt{D_e + r_e^2 A_0\left(\frac{1+2\alpha+2\gamma+4\alpha\gamma-a}{a+1}\right)\varepsilon^2} \end{aligned} \tag{3.31}$$

La formule d'énergie ci-dessus représente une solution générale contenant le paramètre de couplage de masse ε qui façonne la fonction de masse (3.8). Par exemple, lorsque la masse est constante c.-à-d. $\varepsilon = 0$, le spectre d'énergie prend la forme :

$$\varepsilon_{nl} = \frac{1}{2}\frac{\gamma_2}{\sqrt{\gamma_1}} - \left(n+\frac{1}{2}\right), \tag{3.32}$$

Où il peut être explicitement exprimé comme :

$$E_{n\ell} = B_0\left(1 - \frac{3}{\beta} + \frac{3}{\beta^2}\right) - A_0\left[\frac{p_1}{\sqrt{p_2}}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right],\ n = 0, 1, 2, ..., n_{\max}, \ell = 0, 1, 2, ...$$

$$p_1 = \frac{D_e}{A_0} - \frac{\ell(\ell+1)}{\beta^2}\left(\frac{2}{\beta} - \frac{3}{\beta^2}\right) \text{ et } p_2 = \frac{D_e}{A_0} - \frac{\ell(\ell+1)}{\beta^2}\left(\frac{1}{\beta} - \frac{3}{\beta^2}\right) \tag{3.33}$$

qui est le spectre d'énergie de la rotation-vibration pour le potentiel de l'oscillateur de Morse. Par conséquent, le spectre d'énergie de vibration pour les ondes ($\ell = 0$) est :

$$E_n = -A_0\left[\sqrt{\frac{D_e}{A_0}} - \left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^2, \qquad n = 0, 1, 2..., n_{\max} \leq \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{4D_e}{A_0}} - 1\right) \tag{3.34}$$

Où n_{max} est le nombre entier d'états liés pour tout le spectre près de la zone continue.

Le spectre d'énergie ci-dessus coïncide avec ceux donnés dans la littérature. Dans ce qui suit, les fonctions d'onde correspondantes sont calculées. Les fonctions d'onde peuvent être obtenues à partir des relations (A6-A10) de l'annexe A. Au début, la fonction de poids peut être trouvée comme :

$$\rho(z) = z^{2\varepsilon_{n\ell}}(1 - \varepsilon z)^s$$

Avec ε_{nl} donné par l'équation (3.28) qui exprime la première partie des fonctions d'onde comme :

$$y_n(z) \to p_n^{(2\varepsilon_{n\ell}S)}(1 - 2\varepsilon z), \tag{3.35}$$

et la deuxième partie comme

$$\phi(z) = z^{\varepsilon_{n\ell}}(1 - \varepsilon z)^{(1+S)/2} \tag{3.36}$$

Pour obtenir la fonction d'onde non normalisée exprimée en termes des polynômes de Jacobi, une combinaison entre les équations (3.36) et (3.37) mène à :

$$\varphi(z) = N_{n\ell}\frac{n!\Gamma(2\varepsilon_{n\ell} + 1)}{\Gamma(n + 2\varepsilon_{n\ell} + 1)} z^{\varepsilon_{nl}}(1 - \varepsilon z)^{(1+S)/2} p_n^{(2\varepsilon_{n\ell}S)}(1 - 2\varepsilon z) \tag{3.37}$$

D'autre part, la relation liant les polynômes de Jacobi à la fonction hypergéométrique est :

$$ {}_2F_1\left(-n, n+\upsilon+\mu+1, \upsilon+1, \frac{1-\varkappa}{2}\right) = \frac{n!\Gamma\left(\upsilon+1\right)}{\Gamma\left(n+\upsilon+1\right)} P_n^{(\upsilon,\mu)}(\varkappa), $$

pour réécrire les fonctions d'onde radiales comme

$$ \begin{aligned} \phi(r) &= N_{n\ell}\frac{n!\Gamma(2\varepsilon_{n\ell}+1)}{\Gamma(n+2\varepsilon_{n\ell}+1)} e^{-b\varepsilon_{n\ell}(r-r_e)}\left(1-\varepsilon e^{-b(r-r_e)}\right)^{(S+1)/2} \\ &\quad \times {}_2F_1\left(-n; n+2\varepsilon_{n\ell}+S+1, 2\varepsilon_{n\ell}+1; \varepsilon e^{-b(r-r_e)}\right), \end{aligned} \tag{3.38} $$

et les fonctions d'onde radiales normalisées totales du potentiel ordinaire d'oscillateur de Morse sont :

$$ \begin{aligned} \psi_{n\ell}(r) &= N_{n\ell}\frac{n!\Gamma(2\varepsilon_{n\ell}+1)}{\Gamma(n+2\varepsilon_{n\ell}+1)} e^{-b\varepsilon_{n\ell}(r-r_e)}\left(1-\varepsilon e^{-b(r-r_e)}\right)^{(S-1)/2} \\ &\quad \times {}_2F_1\left(-n; n+2\varepsilon_{n\ell}+S+1, 2\varepsilon_{n\ell}+1; \varepsilon e^{-b(r-r_e)}\right) \end{aligned} \tag{3.39} $$

Où $0 \leq \varepsilon < 1$

et une constante de normalisation

$$ N_{n\ell} = \frac{1}{\Gamma\left(2\varepsilon_{n\ell}+1\right)}\left[\frac{n\Gamma\left(S+2\right)}{2b\Gamma\left(n+2\varepsilon_{n\ell}+1\right)}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m\left(n+2\varepsilon_{n\ell}+S+1\right)_m\Gamma\left(n+m\right)}{m!\left(m+2\varepsilon_{n\ell}\right)!\Gamma\left(m+2\varepsilon_{n\ell}+S+2\right)}f_{n\ell}\right]^{-1} \tag{3.40} $$

où

$$ f_{n\ell} = {}_3F_1\left(2\varepsilon_{n\ell}+m, -n+2\varepsilon_{n\ell}+S+1, 2\varepsilon_{n\ell}+m+S+2; 1\right), $$

Avec $S = c_{11}$ qui est défini dans l'équation (3.23). Il convient de noter que les solutions ci-dessus se comportent bien aux limites. C'est-à-dire qu'une solution est régulière près de l'origine $\psi_{n\ell}(r \to 0) \to e^{b\varepsilon_{n\ell}r_e}\left(1-\varepsilon e^{br_e}\right)^{(S-1)/2}$ et se comporte asymptotiquement à l'infini comme $\psi_{nl}\left(r \to \infty\right) \to 0$.

Lorsque la masse devient constante, la fonction de poids donnée par l'équation (2.21) peut être trouvée comme :

$$ \rho(z) = z^{2\varepsilon_{nl}}e^{-2\sqrt{\gamma 1}z} $$

ce qui conduit aux polynômes de Laguerre :

$$y_n(z) \to z^{-2\varepsilon_{n\ell}} e^{-2\sqrt{\gamma_1}z} \frac{d^n}{dz^n} \left(z^{n+2\varepsilon_{n\ell}} e^{-2\sqrt{\gamma_1}z} \right) \to L_n^{2\varepsilon_{n\ell}}(\varkappa) \tag{3.41}$$

Où $\varkappa = 2\sqrt{\gamma_1}z$. La deuxième partie des fonctions d'onde données par l'équation (2.3) peut être trouvée comme :

$$\phi(z) = z^{\varepsilon_{n\ell}} e^{-\sqrt{\gamma_1}z} \tag{3.42}$$

Par conséquent, les fonctions d'onde non normalisées exprimées en termes de polynômes de Jacobi se lisent comme :

$$\psi_{n\ell}(r) = B_{n\ell} \frac{1}{r} \left(2\sqrt{\gamma_1}\right)^{-\varepsilon_{n\ell}} \varkappa^{\varepsilon_{n\ell}} e^{-\varkappa/2} L_n^{2\varepsilon_{n\ell}}(\varkappa) \tag{3.43}$$

Avec : $\varkappa = \sqrt{\gamma_1} e^{-b(r-r_e)}$ et $B_{n\ell}$ est la constante de normalisation.

3.1.2 Cas d'un potentiel de Morse déformé en q

En choisissant la limite des atomes séparés comme énergie nulle, le potentiel de Morse déformé en q [31] est défini sous la forme :

$$V_M(r) = D_e \left[q - e^{-\alpha\varkappa}\right]^2 = V_1 e^{-2\alpha\varkappa} - V_2 e^{-\alpha\varkappa} + V_3 \tag{3.44}$$

Où :

$$\begin{cases} \alpha = a r_e \\ \varkappa = (r - r_e) \diagup r_e \\ V_1 = D_e, \quad V_2 = 2qD_e \quad \text{et } V_3 = q^2 D_e \end{cases}$$

La gamme pour le paramètre de déformation q dans le potentiel ci-dessus a été pris comme $q > 0$ et a été étendu à $-1 \leq q < 0$ où $q > 0$ ou même complexe. à $r_e = r$, il a une valeur minimale à $V_M(r_e) = D_e(q-1)^2$et approche qD_e exponentiellement pour un grand r. Si $1/\alpha < r_e$, il devient grand (mais pas infini) lorsque $r \to 0$. Cette forme de potentiel est applicable aux molécules diatomiques. Pour le cas des molécules multiatomiques, la généralisation des potentiels de Morse peut être exprimée par la méthode EVB (Empirical Valence Bond).

L'équation de Schrödinger généralisée avec PDM pour le potentiel de Morse déformé

défini par l'équation(3.44), prend la forme :

$$\overrightarrow{\nabla}\left(\frac{1}{m}\overrightarrow{\nabla}\psi(r)\right)+2\left[E_{nl}-V(r)\right]\psi(r)=0 \tag{3.45}$$

Avec $m=m(r)$ et $E_{n\ell}$ sont la fonction de masse réelle et les valeurs propres de l'énergie, respectivement.

Le potentiel étant central, la fonction d'onde est séparée en un produit d'une partie radiale et une angulaire (les Y_{lm}) :

$$\psi(r)=\frac{1}{r}R_l(r)Y_{lm}\left(\theta,\phi\right) \tag{3.46}$$

Ce qui donne l'équation radiale suivante :

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2}+\frac{m'}{m}\left(\frac{1}{r}-\frac{d}{dr}\right)-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E_{nl}-V(r)\right]\right\}R_l(r)=0 \tag{3.47}$$

Où $m'=\frac{dm(r)}{dr}$ et $R_l\left(r\right)$ sont les fonctions d'ondes radiales. Il est à noter que pour le cas de $m'=0$, l'équation ci-dessus se réduit à l'équation bien connue à masse constante.

En outre, cette dernière équation avec l'utilisation de la transformation

$$R_\ell(r)=\sqrt{m}u_l(r) \tag{3.48}$$

se réduit à l'équation de type Schrödinger :

$$\begin{aligned}-\frac{d^2u_l(r)}{dr^2}+V_{eff}(r)u_l(r) &= \frac{2mE_{n\ell}}{\hbar^2}u_l(r), u_l(0)=0, \\ V_{eff}(r) &= -\frac{m''}{2m}+\frac{3}{4}\left(\frac{m'}{m}\right)^2-\frac{m'}{m}\frac{1}{r}+\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}V(r)\end{aligned} \tag{3.49}$$

Où le potentiel d'interaction dans l'équation ci-dessus est considéré comme le potentiel de Morse déformé en q (3.44). De plus, pour les solutions aux états liés, c'est-à-dire les valeurs propres de l'énergie réelle, les fonctions d'onde $u_l(r)$ doivent être finies près de $r=0$ quand $r\rightarrow\infty$. L'approximation de Pekeris est utilisée pour le terme centrifuge $l(l+1)/r^2$ du potentiel. Pour cela il faut procéder à un changement approprié du paramètre $r=r_e(1+x)$ et effectuer le développement au second ordre en $x(r/r_e)$ autour de $x=0(r=r_e)$ à faible énergie d'excitation ($r\approx r_e$). les paramètres d'extension a_i et b_i $(i=0,1,2)$ sont obtenus comme le montre l'Annexe B. Ainsi, avec les approximations de Pekeris, la solution semi-analytique de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse déformé en $q(l\neq 0)$ devient abordable.

Pour le modèle de potentiel actuel, le choix exponentiel pour la masse permet de transformer l'hamiltonien de Morse à celui correspondant à une masse constante. Puisque le champ entre les deux noyaux en interaction est de courte portée dont le potentiel de Morse en est un exemple, il est tentant de définir la masse comme ayant la forme d'un inverse du potentiel de Morse :

$$m = \frac{m_0}{(1-\delta z)^2}, \quad m' = -\frac{2m_0\delta\alpha z}{(1-\delta z)^3}, \quad m'' = \frac{2m_0\delta\alpha^2 z}{(1-\delta z)^3} + \frac{6m_0\delta^2\alpha^2 z^2}{(1-\delta z)^4} \tag{3.50}$$

où $z = e^{-\alpha\varkappa} \in (0,1)$ et $0 \leq \delta < 1$. La fonction de masse ci-dessus fonctionne bien dans le modèle actuel et il en résulte une équation d'onde résoluble. Cependant, dans ce choix, lorsque la valeur du paramètre δ est faible $\delta \to 0$, il n'y a pas de perte de généralité.

Ensuite, l'équation (3.49) à l'aide de l'équation (3.50), et des développements faits à l'annexe B se réduit à :

$$\begin{aligned} u_l''(z) + \tfrac{1}{z}u_l'(z) + \tfrac{1}{z^2(1-\delta z)^2}\{\tfrac{2m_0}{\hbar^2a^2}\left(E_{nl}-V_3\right) - \tfrac{\gamma a_0}{a^2}\left(\tfrac{2m_0}{\hbar^2a^2}V_2 - \tfrac{\gamma a_1}{a^2} + S\delta\right)z \\ - \left(\tfrac{2m_0}{\hbar^2a^2}V_1 - \tfrac{\gamma a_2}{a^2} + P\delta + Q\delta^2\right)z^2\}u_l(z) = 0 \end{aligned} \tag{3.51}$$

avec

$$\begin{cases} S = r_e^2 - \frac{2b_0}{a} + \frac{2\gamma a_0}{a^2}, \\ P = \frac{2b_1}{a} - \frac{2\gamma a_1}{a^2}, \\ Q = r_e^2 - \frac{2b_0}{a} + \frac{\gamma a_0}{a^2} \end{cases} \tag{3.52}$$

Où $u_l(z) = u_l(r)$. En définissant les paramètres comme suit :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n\ell} &= \frac{1}{a}\sqrt{\gamma a_0 + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E_{nl}-V_3\right)}, \ \beta_1 = \frac{1}{a^2}\left(\frac{2m_0}{\hbar^2}V_1 + \gamma a_2\right) + P\delta + Q\delta^2, \\ \beta_2 &= \frac{1}{a^2}\left(\frac{2m_0}{\hbar^2}V_2 + \gamma a_1\right) + S\delta \end{aligned} \tag{3.53}$$

L'équation (3.51) se réduit à la forme :

$$\frac{d^2u_l(z)}{dz^2} + \frac{1}{z}\frac{du_l(z)}{dz} + \frac{1}{\left[z\left(1-\delta z\right)\right]^2}\left(-\beta_1 z^2 + \beta_2 z - \varepsilon_{nl}^2\right)u_l(z) = 0 \tag{3.54}$$

La comparaison de l'équation (3.54) avec (2.1) permet d'obtenir les valeurs spécifiques des constantes paramétriques (voir annexe A[32]) et sont présentés dans le tableau 2 pour le modèle de potentiel actuellement utilisé. De plus, à l'aide du tableau 2, les polynômes clés donnés dans l'annexe A prennent maintenant les formes analytiques particulières suivantes :

$$\pi(z) = \varepsilon_{nl} - \frac{\delta}{2}\left(1 + 2\varepsilon_{nl} + \xi\right) z \tag{3.55}$$

$$k = \beta_2 - \delta\left(2\varepsilon_{nl} + \xi\right)\varepsilon_{nl} \tag{3.56}$$

$$\tau = 1 + 2\varepsilon_{n\ell} - \delta\left(2 + 2\varepsilon_{n\ell} + \xi\right) z \tag{3.57}$$

Avec $\tau'(z) = -\delta\left(2 + 2\varepsilon_{n\ell} + \xi\right) < 0$, où $\xi = \sqrt{1 + 4\varepsilon_{n\ell}^2 + \frac{4}{\delta}\left(\frac{\beta_1}{\delta} - \beta_2\right)}$.En insérant les valeurs des constantes données dans le tableau 2 dans l'équation d'énergie citée à l'annexe A, l'énergie vaut :

$$\varepsilon_{n\ell} = \frac{1}{2}\frac{n(n+1)\delta - 2(n+\frac{1}{2})\sqrt{\beta_1} + \beta_2}{\sqrt{\beta_1} - \left(n+\frac{1}{2}\right)\delta} \tag{3.58}$$

L'équation ci-dessus peut être écrite plus explicitement pour les valeurs propres de l'énergie à l'état lié de rotation comme :

$$E_{nl} = V_3 + \frac{\hbar^2 l\left(l+1\right) a_0}{2m_0 r_e^2} - \frac{\hbar^2 a^2}{8m_0}\left[\frac{n(n+1)\delta - 2(n+\frac{1}{2})\sqrt{\beta_1} + \beta_2}{\sqrt{\beta_1} - \left(n+\frac{1}{2}\right)\delta}\right]^2,\ n, \ell = 0,\ 1,\ 2,\ ..., \tag{3.59}$$

et après avoir substitué les paramètres β_1 et β_2 de l'équation (3.53), les valeurs propres de l'énergie exprimées en fonction des paramètres $V_i (i = 1, 2, 3)$ comme

$$E_{n\ell} = V_3 + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1) a_0}{2m_0 r_e^2} - \frac{\hbar^2 a^2}{8m_0} \tag{3.60}$$
$$\times\left[\frac{n(n+1)\delta - 2(n+\frac{1}{2})\sqrt{\frac{1}{a^2}\left(\frac{2m_0}{\hbar^2}V_1 + \frac{l(l+1)a_2}{r_e}\right) + P\delta + Q\delta^2} + \frac{1}{a^2}\left(\frac{2m_0}{\hbar^2}V_2 + \frac{l(l+1)a_1}{r_e}\right) + S\delta}{\sqrt{\frac{1}{a^2}\left(\frac{2m_0}{\hbar^2}V_1 + \frac{l(l+1)a_2}{r_e}\right) + P\delta + Q\delta^2} - (n+\frac{1}{2})\delta}\right]$$

Où S, Q et P sont des paramètres constants donnés par l'équation (3.52). En particulier, pour le cas d'une masse constante, c.-à-d. à la limite $\delta \to 0$ $(m \to m_0)$, nous pouvons réduire l'équation ci-dessus en :

$$\varepsilon_{n\ell} = \frac{\beta_2}{2\sqrt{\beta_1}} - (n + \frac{1}{2}) \tag{3.61}$$

Ou plus explicitement comme

$$
\begin{aligned}
E_{n\ell} &= V_3 + \frac{\hbar^2}{2\mu r_e^2} l\left(l+1\right)\left(1 - \frac{3}{ar_e} + \frac{3}{a^2 r_e^2}\right) \\
&\quad - \frac{\hbar^2 a^2}{2\mu}\left[\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2 a^2}} \frac{\frac{V_2}{2} - \frac{\hbar^2}{2\mu r_e^2} l\left(l+1\right)\left(\frac{2}{ar_e} - \frac{3}{a^2 r_e^2}\right)}{\sqrt{V_1 - \frac{\hbar^2}{2\mu r_e^2} l\left(l+1\right)\left(\frac{1}{ar_e} - \frac{3}{a^2 r_e^2}\right)}} - \left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^2
\end{aligned}
\tag{3.62}
$$

Avec $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ désigne la masse réduite de la molécule diatomique. L'équation ci-dessus représente les valeurs des énergies propres pour le potentiel de Morse déformé en q.

Les niveaux d'énergie de l'état vibrationnel lié pour les ondes $s(l = 0)$ sont :

$$
E_n = V_3 - \frac{1}{4\kappa^2}\left[1 + 2n - \eta\kappa\right]^2, \tag{3.63}
$$

Avec

$$
\begin{aligned}
\eta &= \frac{V_2}{\sqrt{V_1}}, \\
\kappa &= \frac{r_e}{\alpha\hbar}\sqrt{2\mu}, \\
n_{\max} &\leq \frac{1}{2}\left(\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar a}\frac{V_2}{\sqrt{V_1}} - 1\right),
\end{aligned}
\tag{3.64}
$$

ou $Vi(i = 1, 2, 3)$ sont définis après l'équation (3.44). Par conséquent, le nombre quantique vibrationnel $n = 0,\ 1,\ 2,\ ...,\ n_{\max}$, où $n_{\max}$ est le nombre d'états liés pour tout le spectre lié près de la zone continue. Ainsi, $n_{\max}$ ne peut pas être infini, ce qui se reflète dans la condition ci-dessus. Par conséquent, les fonctions propres de Morse pour les systèmes réels ne forment pas une algèbre de Lie de dimensions infinies.

Qu'en est-il des calculs des fonctions d'onde correspondantes dans le cas de la variation de masse ? En se référant à l'annexe A et au tableau 2, la forme explicite de la fonction poids est

$$
\rho(z) = z^{2\varepsilon_{n\ell}}(1 - \delta z)^{\xi}, \tag{3.65}
$$

Avec $\varepsilon_{n\ell}$ donné par l'équation (3.58). La fonction poids ci-dessus donne la première partie des fonctions d'onde

$$
y(z) \rightarrow P_n^{(2\varepsilon_{nl},\xi)}\left(1 - 2\delta z\right), \tag{3.66}
$$

et la deuxième partie des fonctions d'onde peut être trouvée comme

$$\phi(z) \to z^{\varepsilon_{n\ell}}(1-\delta z)^{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\xi}. \tag{3.67}$$

Par conséquent, les fonctions d'onde non normalisées sont exprimées en termes des polynômes de Jacobi comme

$$u_l(z) = N_n z^{\varepsilon_{n\ell}} \left(1-\delta z\right)^{\frac{1}{2}(1+\xi)} P_n^{(2\varepsilon_{n\ell},\xi)}\left(1-2\delta z\right),\ 0<\delta<1, \tag{3.68}$$

où la constante de normalisation est calculée à l'aide des formules placées en annexe A comme :

$$\begin{aligned} N_n = &\left[\tfrac{\Gamma(2\varepsilon_{nl}+1)(\xi+2)}{\alpha\delta^{\varepsilon_{nl}}\Gamma(n)}\sum_{p=0}^{\infty}\tfrac{(-1)^p\Gamma(n+p)(n+1+2\varepsilon_{nl}+\xi)_p}{p!(p+2\varepsilon_{nl})(p+2\varepsilon_{nl}+\xi+2)}\right. \\ &\left.\times{}_3F_2(p+2\varepsilon_{nl},-n,n+2\varepsilon_{nl}+\xi+1;p+2\varepsilon_{nl}+\xi+2;1+2\varepsilon_{nl};1\right]^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{3.69}$$

Avec $\varepsilon_{n\ell}$ et ξ sont donné dans l'équation (3.58) et après l'équation (3.57), respectivement. $(x)_p$ est le symbole de Pochhammer défini comme :

$$(x)_p = \frac{\Gamma(x+p)}{\Gamma(x)}. \tag{3.70}$$

Ainsi, la partie radiale totale des fonctions d'onde du potentiel généralisé déformé en q est

$$\begin{aligned} \psi_l(r) &= N_n\frac{1}{r}\left[\exp\left[-a\left(r-r_e\right)\right]\right]^{\varepsilon_{n\ell}}\left(1-\delta\exp\left[-a\left(r-r_e\right)\right]\right)^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\xi} \\ &\quad\times P_n^{(2\varepsilon_{n\ell};\xi)}\left(1-2\delta\exp\left[-a\left(r-r_e\right)\right]\right), \\ 0 &< \delta<1 \end{aligned}$$

N_n est défini par l'équation (3.69).

Le cas d'une masse constante doit être traité séparément. Afin d'éviter les répétitions, il suffit d'utiliser les calculs précédents pour trouver une forme explicite pour la fonction de poids comme

$$\rho(z) = z^{2\varepsilon_{n\ell}}\exp\left[-2\sqrt{\beta_1}z\right]$$

ce qui donne les polynômes de Laguerre :

$$y_n(z) \to z^{-2\varepsilon_{nl}}\exp\left[2\sqrt{\beta_1}z\right]\frac{d^n}{dz^n}\left(z^{n+2\varepsilon_{n\ell}}\exp\left[2\sqrt{\beta_1}z\right]\right) \to L_n^{2\varepsilon_{n\ell}}(y) \tag{3.71}$$

Où $y = 2\sqrt{\beta_1}z$. La seconde partie des fonctions d'ondes prend la forme

$$\phi(z) \rightarrow z^{\varepsilon_{nl}} \exp\left[-\sqrt{\beta_1}z\right] \tag{3.72}$$

Par conséquent, les fonctions d'onde non normalisées exprimées en termes de polynômes de Laguerre sont

$$R_\ell(r) = N_n \left(2\sqrt{\beta_1}\right)^{-\varepsilon_{n\ell}} y^{\varepsilon_{n\ell}} \exp\left(-\frac{y}{2}\right) L_n^{2\varepsilon_{n\ell}}(y) \tag{3.73}$$

où $y = 2\sqrt{\beta_1}\exp\left[-a\left(r - r_e\right)\right]$.

Conclusion

Notre travail s'intéresse à la résolution de l'équation de Schrödinger généralisée à des systèmes à masses dépendant de la position par la méthode de Nikiforov-Uvarov. Nous avons traité l'équation de Schrödinger lorsque la masse est constante et sa généralisation pour une masse dépendante de la position. Puis, nous avons donné une revue historique sur les travaux les plus importants réalisés par les auteurs dans ce domaine, ainsi que les valeurs proposées pour les paramètres d'ambiguïté. à titre d'exemple nous avons donné les coefficients de transmission et de réflexion pour les cas de barrières rectangulaires simples et doubles en potentiel et en masse, obtenus par la résolution analytique de l'équation de Schrödinger généralisée. Par la suite, nous avons exposé en détail la méthode de Nikiforov-Uvarov. Comme illustration de cette dernière nous avons choisi la résolution de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse et les équations de Klein-Gordon et de Dirac pour le champ coulombien. A la fin, nous avons présenté, via la méthode NU, la résolution de l'équation de Schrödinger généralisée à des systèmes à masses dépendant de la position pour les potentiels de Morse et de Morse déformé en q.

Annexe A : Généralisation paramétrique pour la méthode NU

La formulation théorique de la méthode NU est complétée en présentant les polynômes essentiels, l'équation d'énergie et les fonctions d'onde ainsi que leurs constantes pertinentes comme suit :

(i) Les polynômes clés :

$$\pi(z) = c_4 + c_5 z - \left[\left(\sqrt{c_9} + c_3\sqrt{c_8}\right) z - \sqrt{c_8}\right] \tag{A1}$$
$$k = -(c_7 + 2c_3c_8) - 2\sqrt{c_8c_9}, \tag{A2}$$
$$\tau(z) = 1 - (c_2 - 2c_5)z - 2\left[\left(\sqrt{c_9} + c_3\sqrt{c_8}\right) z - \sqrt{c_8}\right] \tag{A3}$$
$$\tau'(z) = -2c_3 - 2\left(\sqrt{c_9} + c_3\sqrt{c_8}\right) < 0 \tag{A4}$$

(ii) L'équation d'énergie :

$$(c_2 - c_3)n + c_3n^2 - (2n+1)c_5 + (2n+1)(\sqrt{c_9} + c_3\sqrt{c_8}) + c_7 + 2c_3c_8 + 2\sqrt{c_8c_9} = 0 \tag{A5}$$

(iii) Les fonctions d'onde :

$$\rho(z) = z^{c_{10}}\left(1 - c_3 z\right)^{c_{11}} \tag{A6}$$

$$\phi(z) = z^{c_{12}}\left(1 - c_3 z\right)^{c_{13}} \tag{A7}$$
$$y_n(z) = P_n^{(c_{10},c_{11})}\left(1 - 2c_3 z\right) \tag{A8}$$

$$u(z) = N_n z^{c_{12}}\left(1 - c_3 z\right)^{c_{13}} P_n^{(c_{10},c_{11})}\left(1 - 2c_3 z\right) \tag{A9}$$

Avec $P_n^{(\alpha,\beta)}(1-2s)$ sont les polynômes de Jacobi, avec :

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(1-2s) = \frac{(\alpha+1)_n}{n!} \times_2 F_1\left(-n, 1+\alpha+\beta+n; \alpha+1; s\right) \tag{A10}$$

et N_n est un facteur de normalisation. En outre, les fonctions d'onde ci-dessus peuvent être exprimées en termes de la fonction hypergéométrique comme :

$$u(z) = N_n z^{c_{12}}(1 - c_3 z)^{c_{13}}\ {}_2F_1(-n, 1 + c_{10} + c_{11} + n; c_{10} + 1; c_3 z) \tag{A11}$$

Où ${}_2F_1(a,b,c,d) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+p)\Gamma(b+p)}{\Gamma(c+p)} \frac{z^p}{p!}$. La constante de normalisation est obtenue en utilisant la condition : $\int_0^\infty u^2(r)dr = 1$ et

$$\int_0^1 (1-s)^{\mu-1} s^{\nu-1}\ {}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, as)dz = \frac{\Gamma(\mu)\Gamma(\nu)}{\Gamma(\mu+\nu)}\ {}_3F_1(\nu, \alpha, \beta; \mu+\nu; \gamma; a) \tag{A12}$$

(*iv*) Les constantes pertinentes :

$$c_4 = \tfrac{1}{2}(1 - c_1), c_5 = \tfrac{1}{2}(c_2 - 2c_3), c_6 = c_5^2 + A,$$
$$c_7 = 2c_4c_5 - B, c_8 = c_4^2 + C, c_9 = c_3 = (c_7 + c_3c_8) + c_6,$$
$$c_{10} = c_1 + 2c_4 + 2\sqrt{c_8} - 1, c_{11} = 1 - c_1 - 2c_4 + \tfrac{2}{c_3}\sqrt{c_9},$$
$$c_{12} = c_4 + \sqrt{c_8}, c_{13} = -c_4 + \tfrac{1}{c_3}(\sqrt{c_9} - c_5). \qquad \text{(A13)}$$

Annexe B : L'approximation de Perkis pour le potentiel rotationnel de Morse

Dans cette annexe, l'approximation de Pekeris est donnée jusqu'au seconde ordre en r/r_e. Premièrement les changements des paramètres et des coordonnées sont faits comme suit : $x = (r - r_e)/r_e$ et en faisant le développement autour de $x = 0(r = r_e)$ pour obtenir :

$$V_{rot}(x) = \frac{\gamma}{(1+x)^2} = \gamma_1[1 - 2x + 3x^2 + O(x^3)], \gamma = \frac{l(l+1)}{r_e^2} \quad \text{(B1)}$$

où les premiers termes sont suffisants pour les états de rotation à faible excitation puisque $r \approx r_e$. Le terme rotationnel correspondant exprimé sous forme exponentielle jusqu'au second ordre

est

$$\tilde{V}_{rot}(x) = \gamma(a_0 + a_1 e^{-\alpha z} + a_2 e^{-2\alpha z}), \quad \text{(B2)}$$

$$\tilde{V}_{rot}(x) = \gamma[a_0 + a_1(1 - \alpha x + \frac{(\alpha x)2}{2!} - O(x^3)) + a_2(1 - 2\alpha x + \frac{(2\alpha x)2}{2!} - O(x^3)],$$

$$= \gamma[\sum_{i=0}^{2} a_i - \alpha(a_1 + 2a_2)x + \alpha_2(\frac{a_1}{2} + 2a_2)x^2 - O(x^3)], \quad \text{(B3)}$$

Où $a_i(i = 1, 2, 3)$ sont les coefficients d'expansion. La comparaison de (B1) avec (B4), permet d'obtenir les valeurs spécifiques pour les coefficients d'expansion comme :

$$a_0 = 1 - \frac{3}{\alpha}(1 - \frac{1}{\alpha}), a_1 = \frac{2}{\alpha}(2 - \frac{3}{\alpha}), a_2 = -\frac{1}{\alpha}(1 - \frac{3}{\alpha}), \alpha = ar_e \quad \text{(B4)}$$

D'autre part, la même procédure permet d'obtenir un développement en exponentielle pour le terme $1/r$ autour de $x = 0$ $(r = r_e)$:

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{re(1+x)} = \frac{1}{re}[1 - x + x^2 - O(x^3)] \quad \text{(B5)}$$

ou de manière équivalente dans le développement en exponentielle :

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{re}(b_0 + b_1 e^{-\alpha z} + b_2 e^{-2\alpha z}),$$

$$= \frac{1}{re}[\sum_{i=0}^{2} b_i - \alpha(b_1 + 2b_2)x + \alpha_2(\frac{b_1}{2} + 2b_2)x_2 - O(x^3)] \quad \text{(B6)}$$

Ainsi, en comparant $(B.5)$ à $(B.6)$, les coefficients d'expansion prennent les valeurs

$$b_0 = 1 - \frac{1}{\alpha}(\frac{3}{2} - \frac{1}{\alpha}), b_1 = \frac{2}{\alpha}(1 - \frac{1}{\alpha}), b_2 = -\frac{1}{\alpha}(\frac{1}{\alpha}(\frac{1}{2} - \frac{1}{\alpha}), \alpha = ar_e. \quad \text{(B7)}$$

9

Constant	Value	Constant	Value
c_1	1	c_2	δ
c_3	δ	c_4	0
c_5	$-\frac{1}{2}\delta$	c_6	$\frac{1}{4}\left(\delta^2+4\beta_1\right)$
c_7	$-\beta_2$	c_8	ε_{nl}^2
c_9	$\frac{1}{4}\delta^2\xi^2$	c_{10}	$2\varepsilon_{nl}$
c_{11}	ξ	c_{12}	ε_{nl}
c_{13}	$\frac{1}{2}\left(1+\xi\right)$	A	β_1
B	β_2	C	ε_{nl}^2

9.png

Tableau −2− : Les valeurs spécifiques des constantes paramétriques nécessaires au potentiel actuel.

Bibliographie

[1] Bastard G., Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructure, (Editions Les Ulis de Physique,1988).

[2] Seraa L.I. and Lipparini E., "Spin Response of Unpolarized Quantum Dotes", Europhys.Lett.40, 667-672(1997).

[3] Levai G., "Solvable Potentiels Associated with Su(1,1) Algebras : a Systematic Study", J.Phys.A : Maths.Gen.27, 3809-3828(1994).

[4] Barranco M., Pi M., Gatica S. M., Hernandez E. S. and Navarro J., " Structure and Energetics of mixed $_4He -_3 He$ drops", Phys. Rev. B 56, 8997–9003 (1997).

[5] Yung K. C. and Yee J. H., " Derivation of the modified Schrödinger equation for a particle with spatially varying mass through path integrals", Phys. Rev. A 50, 104-106 (1994).

[6] Puente A., Serra A.and Casas M., " Dipole excitation of Na clusters with a nonlocal energy density functional", Zeitschrift fû Physik D 31, 283-286 (1994).

[7] Arda A.and Sever R.," Bound State Solutions of Schrödinger Equation for Generalized Morse Potential with Position-Dependent Mass", Theor. Phy, Vol 56, Issue 1, 51, (2011).

[8] Antoine X., Arnold A., Besse C., Ehrhardt M.and Schadle A., "A Review of Transparent and Artificial Boundary Conditions Techniques for Linear and Nonlinear Schrödinger Equations", ZIB-Report 07-34 (Novembre 2007)

[9] Khiyer M., Morsli A., "Equation de Dirac Appliquée à des Systèmes à Masses Dépendant de la Position dans un champ Coulombien", Mémoire de Master, Université de Médéa, (2011).

[10] Cheteigner D., "Mesures Physiques" IUT Caen (2003).

[11] Flugge S., "Practical Quantum Mechanics", Vol. I (Springer, Berlin, 1994)

[12] Flugges S., "Pratical Quantum Mechanics II. ", Springer, Berlin, (1971).

[13] Ben Daniel D.J.et Duke C.B., "Space-charge effects on electron tunneling ", Phys. Rev. 152, 683-692, 1966.

[14] Gora T., Williams F., " Theory of electronic states and transport in graded mixed semiconductors", Phys. Rev. 177, 1179-1182, 1969.

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

[16] Levy-Leblond J.M., "Position-Dependant Effective Mass and Galilean Invariance", Phys.Rev.A52.184, (1995).

[17] Dekar L., Chetouani L., and Hammam T.F., "Green's function via path integrals for systems with position-dependant masses " Phys.Rev A 52.82, (1995).

[18] Dekar L., Chetouani L., and Hammam T.F., " An exactly soluble Schrödinger equation with smooth position-dependent mass " J. Math. Phys. 39, 2551-2563 (1998).

[19] Dekar L., Chetouani L., and Hammann T. F., "Wave function for smooth potential and mass step", Phys. Rev., A59, 107, (1999).

[20] de Souza Dutra A., Almeida C.A.S., "Exact solvability of potentials with spatially dependent effective masses", Phys.A 275. 25–30(2000).

[21] Mustafa O., Habib Mazharimousavi S., "Ordering ambiguity revisited via position dependent mass pseudo-momentum operators", Int. J.Theory.Phys. 46, 1786, (2007).

[22] Bouferrache K., " Calcul des Coefficients de Transmission pour une Barrière Trapézoïdale en Potentiel et en Masse pour l'hamiltonien Généralisé à des Masses Dépendant de la Pposition", Mémoire de Magister, Université de Médéa, (2011).

[23] Filho E. D., "Super Symmetric Quantum Mechanics and New Potentials", Revista Brasileira de Fisica, 30, 3 258 - 266, (1990).

[24] Cooper F., Khare A.and Sukhatime U. P., "Super-Symmetry in Quantum Mechanics", (Word Scientific, Singapore, 2001).

[25] Sedare M. R. and Karimi E., "Algebraic Approach to the Hulthen Potential", arxiv:quant-ph/0703267

[26] Niazian R., "A Super-Symmetry Approach to Hydrogen-like Atoms Under Constant Electromagnetic Field", African Physical Review,4; 008, 58 (2010).

[27] Nikiforov A., Ouvarov V.,"Fonctions Spéciales de la Physique Mathématiques "Birkauser. Bâle (1988).

[28] Berkdemir C.,"Application of the Nikiforov-Uvarov Method in Quantum Mechanics",ISBN: 978-953-51-0088-1, (2012).

[29] Ikhdair Sameer M. "Effective Schrödinger equation with general ordering ambiguity position-dependent mass Morse potential ‘’, (2012). Molecular Physics 110(13):1415-1428 , 2012 ; arxiv:quant-ph :1203.2023

[30] Schmidt.A.G.M, Phys. Lett. A 353 (2006) 459.

[31] Ikhdair Sameer M, ‘’Rotation and vibration of diatomic molecule in the spacially –dependent mass Schrödinger equation with generalized q- deformed Morse potential ‘’, Chemical Physics 361, 9-17, , 2009, arxiv:quant-ph :0904.4366.