République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieure et de la Recherche Scientifique
Université de Médéa
Faculté des Sciences



Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de Master

en *Physique*

Spécialité : *Physique Théorique*

Par :

BOUSSAID Karima

DAOUADJI Atika

Thème

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

---

Soutenu publiquement le : 20 / 06 / 2018, devant le jury composé de :

Dr ZITOUNI Hannachi	MCA	Université de Médéa	Président
Dr ZAGHOU Nasreddine	MCB	Université de Médéa	Examinateur
M. BOUCHACHIA Karim	MAA	Université de Médéa	Examinateur
Dr DEKAR Liés	MCA	Université de Médéa	Encadreur

année universitaire 2017/2018

Remerciements

Au terme de ce mémoire nous tenons à remercier tout naturellement en premier lieu DIEU Le Tout puissant qui nous a donné la force, le courage et la patience de bien mener ce projet

Ce travail a été réalisé sous la direction de M. DEKAR Liés notre promoteur, qu'il trouve ainsi l'expression de notre profonde reconnaissance pour son aide, ses encouragements et ses précieux conseils durant le déroulement de cette étude. Nos salutations sont adressées à tous les enseignants de la PG Physique Théorique qui nous ont accompagnés tout au long de notre formation à la Faculté des Sciences de l'Université de Médéa. Nous remersions les membres du Jury : M. ZITOUNI Hannachi qui a accepté d'assurer la présidence du Jury ainsi que Mrs Zaghou Nasreddine et BOUCHACHIA Karim en tant que examinateurs. Nous tenons a remercier spécialement M. BOUCHACHIA Karim qui nous a énormément aidé dans l'utilisation du logiciel Work-Place pour l'édition du manuscrit.

Dédicace

Karima Boussaid dédie ce travail :

A ses très chèrs mère et père.

A ses très chers frères Khaled, Soufian et Aboubaker .

A sa très chère sœur Amel

A tous les membres de sa famille, petits et grands.

A ses très chères amies Mouna Ben mhayrize, Zahia Mechti et Zoubida Benzide.

Et spécialement à son binôme de ce travail Atika Douadji
Aux camarades de sa promotion.

Dédicace

Atika Daouadji dédie ce travail :

A ses très chèrs parents pour tous leurs sacrifices

leur amour et soutien et leur prières tout au long de ses études

A ses chers frères Abd Elhafid, Moussa et Youcef

A ses très chères sœurs Hadda, Widad et Amel

A ses chers nièces Nadjla, Imen et Merieme

et ses neveux Farès, Abdo, Manar et particulièrement Lounes .

A tous les membres de sa famille, petits et grands.

A ses très chères amies Hafida Djarai, Zahia Aroui, Dahbia Djazairi, Aicha Dhaimi et Sarah Khafaf.

Et spécialement à son binôme de ce travail Karima Boussaid
Aux camarades de sa promotion.

Résumé

Dans un premier temps nous avons étudié la résolution des équations non relativiste de Schrödinger, de Klein – Gordon relativiste, et de Dirac pour un champ coulombien et une masse constante par la méthode de Nikiforov-Uvarov (UV). En second lieu nous avons traité les problèmes liés au choix des paramètres d'ambiguïté dans l'expression de l'hamiltonien effectif pour des systèmes quantiques avec une masse qui dépend de la position. Enfin, nous présentons la résolution de l'équation de Klein-Gordon via la méthode NU pour les deux potentiels de Pöschl – Teller et de Hulthén avec des masses qui dépendent de la position. Les spectres d'énergie ainsi que les fonctions d'onde propres pour ces deux cas de figure sont donnés

ملخص

أولاً، قمنا بدراسة حل معادلات شرود نجر (Schrödinger) الغير النسبية، معادلة كلاين – جوردون (Klein-Gordon) النسبية ، وديراك (Dirac) لحقل كولوم (Coulomb) وكتلة ثابتة بواسطة طريقة نيكيفوروف – أوفاروف (Nikiforov-Uvarov). ثانيا ، لقد تعاملنا مع المشاكل المتعلقة باختيار معايير الغموض في تعبير هاميلتون فعال عن أنظمة الكم ذات كتلة متغيرة بدلالة الوضعية.
وأخيرًا ، نقدم حل معادلة كلاين جوردن عبر طريقة NU لكموني (هولتن وبوشل تولر)Pöschl-Teller و Hulthén مع كتل متغيرة بدلالة الوضعية. تعطى أطياف الطاقة بالإضافة إلى دالات الموجة الذاتية لهاتين الحالتين.

Abstract

In the first place, we studied the resolution of the equations of no relativistic Schrodinger, relativistic Klein - Gordon, and relativistic Dirac for a Coulomb field and a constant mass by the Nikiforov - Uvarov(NU) method. Secondly, we have dealt with the problems related to the choice of ambiguity parameters in the expression of the effective Hamiltonian for quantum systems with position depends mass. Finally, we present the resolution of the Klein-Gordon equation via the NU method for the Pöschl-Teller and Hulthén potentials with position-dependent masses. The energy spectrum as well as the wave eigenfunctions for these two cases are given.

Table des matières

Introduction **1**

1 L'équation de Klein-Gordon **3**

1.1 L'équation de Schrödinger 4

1.2 Théorie de Klein-Gordon 8

1.3 Théorie de Dirac 22

2 Méthode de Nikiforov-Uvarov **28**

2.1 L'équation différentielle pour les fonctions spéciales 28

2.2 Résolution de l'équation de Schrödinger pour le champ coulombien. 34

2.3 Résolution des équations de Klein-Gordon et de Dirac pour le champ coulombien 41

3 Les systèmes à masses dépendant de la position **58**

3.1 L'hamiltonien généralisé : 59

3.1.1 Revue historique : 59

3.2 Ordre des opérateurs dans l'hamiltonien avec masse effective dépendant de la position 63

3.2.1 L'hamiltonien pour une masse effective dépendant de la position . . . 63

4 La résolution de l'équation de Klein - Gordon pour différents potentiels et différentes masses **67**

4.1 Résolution de l'équation de Klein - Gordon avec un Potentiel Pöschl - Teller 68

4.1.1 Etats liés à l'équation de Klein - Gordon 69

4.2 Résolution de l'équation de Klein - Gordon avec un potentiel de Hulthén . . 73

4.2.1 Procèder Nikiforov-Uvarov et l'états liés 73

Conclusion **79**

Introduction

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 et mécanique quantique relativiste : la mécanique quantique non relativiste trouve une large application dans beaucoup de problèmes de physique atomique et 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 les spins demi-entiers à l'équation de Dirac.

Le thème de notre mémoire est la Résolution de l'équation de Klein-Gordon généralisée à des systèmes à masses dépendant de la position par la méthode de Nikiforov-Uvarov . Pour atteindre ce but nous avons structuré notre travail en quatre chapitres.

Dans le premier, nous commençons par un petit rappel sur la résolution d'une marche de potentiel par l'équation de Schrödinger valable dans le cas non relativiste. Puis nous rappelons les caractéristiques de l'équation de Klein-Gordon et la conservation du courant. Nous abordons aussi les thémes liés à : la limite non relativiste, l'interactionen électromagnétique, les atomes mésoniques, l'effet *Zitterbewegung*, les antiparticules, Ensuit on s'intéresse à l'équation de Dirac, en particulier à la conservation du courant et les antiparticules. Enfin, pour le cas d'une marche de potentiel, nous comparons les résultats de ces deux équations concernant les antiparticules.

Dans le second chapitre, nous présentons la méthode de Nikiforov-Uvarov pour la résolution de l'équation différentielle relative aux fonctions spéciales. Comme illustration nous proposons pour le cas fondamental d'un potentiel coulombien, la résolution des l'équations de Schrödinger, de Klein-Gordon et de Dirac.

Dans le troisième chapitre nous abordons l'étude quantique de système à masse dépendant de la position, En premier lieu nous discuterons les problèmes fondamentaux posés par la dépendance spatiale de la masse, à savoir le choix d'un hamiltonien effectif, les nouvelles conditions de continuité de la fonction d'onde à travers une hétérojonction, l'ordre des opérateurs masse et impulsion dans l'opérateur énergie cinétique. En second lieu nous donnons quelques exemples de résolution de l'équation généralisée de Schrödinger. Il s'agit des travaux pionniers de **Lévy-Leblond**[**1**] pour une barrière abrupte en potentiel et en masse, et de **Dekar et al**[**2**] pour une marche douce en potentiel et en masse. Enfin nous donnons aussi les résultats de travaux faits dans le cadre de deux mémoires de magister dirigée par notre Encadreur à l'université de Médéa : celui de **Bouferrache** [**3**] sur des barrières simples en potentiel et en masse et celui de **Langue**r [**4**] qui a porté sur des doubles barrières en potentiel et en masse.

Dans le quatrième chapitre, nous présentons une synthèse entre les thèmes traités

précédemment, à savoir l'équation de Klein-Gordon, les systèmes à masses dépendant de la position, et la méthode de résolution de Nikiforov - Uvarov. Comme cas particuliers nous avons opté pour la présentation de la résolution détaillée via la méthode NU de l'équations de Klein - Gordon pour les potentiels de pöschl - teller et de Hulthén avec des masses dépendant de la position. Nous présentons les résultats d'une part des spectres d'énergie et d'autre part des fonctions d'ondes propres pour ces deux derniers potentiels.

Chapitre 1

L'équation de Klein-Gordon

L'équation dynamique décrivant une particule relativiste de spin nul (scalaire) connue sous le nom d'équation de Klein - Gordon, aurait été en faite introduite pour la première fois par Schrödinger. En effet, les prédictions obtenues n'étant pas conforme aux résultats expérimentaux assez précis obtenus par Paschen dès 1916, Schrödinger se serait alors aperçu que c'était l'équation non relativiste - dite aujourd'hui de Schrödinger - qui donnait le bon spectre pour l'hydrogène, Schrödinger n'a publié son équation relativiste que dans le quatrième mémoire en 1926. Entre temps, plus précisément entre les mois d'avril et septembre 1926, pas moins de cinq autres articles, publiés indépendamment, contenaient l'équation dite aujourd'hui de Klein - Gordon.

Enfin, dans son second article de 1926, Fock introduit également la procédure de couplage minimal, décrivant le couplage d'une particule massive avec une charge électrique à un champ électromagnétique externe donné, représenté par un quadri-potentiel A_μ

L'équation de Klein - Gordon, parfois également appelée équation de Klein - Gordon - Fock, est une version relativiste de l'équation de Schrödinger décrivant des particules massives de spin nul avec ou sans une charge électrique, établie indépendamment en 1926 par les physiciens Oskar Klein et Walter Gordon.

Nous étudions en premier lieu l'équation de Schrödinger puis nous présentons de manière concise l'étude les équations de Klein - Gordon et de Dirac avec le point de vue de la mécanique quantique relativiste. On commence chaque fois par une étude générale de l'équation, des courants conservés ainsi que de la généralisation au cas où un champ électromagnétique est présent. On se concentre ensuite sur la limite non relativiste ainsi que son application au problème à potentiel Coulombien. On s'attarde particulièrement sur l'atome d'hydrogène

avec l'équation de Dirac. L'accent est également mis sur le *Zitterbewegung* [1] qui est étudié en détail et de deux manières différentes. Finalement, on motive la prédiction d'antiparticules par un exemple d'une marche de potentiel.

1.1 L'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger à été conçue 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 $\psi\left(t, \overrightarrow{r}\right)$ est d´écrit par l'équation de Schrödinger[5] :

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

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

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

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 $\psi\left(t, \overrightarrow{r}\right)$:

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

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

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

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

$$-\frac{1}{2m}\overrightarrow{\nabla^2}\psi = i\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{1.5}$$

A partir de l'équation de Schrödinger on peut obtenir l'équation dite de continuité densité-

[1] *Le Zitterbewegung : un mot d'origine allemand qui veut dire mouvement de tremblement*

courant, reliant la densité de probabilité p au vecteur courant $\overrightarrow{j}$, donnée par :

$$\overrightarrow{\nabla}.\overrightarrow{j}+\frac{\partial p}{\partial t}=0 \tag{1.6}$$

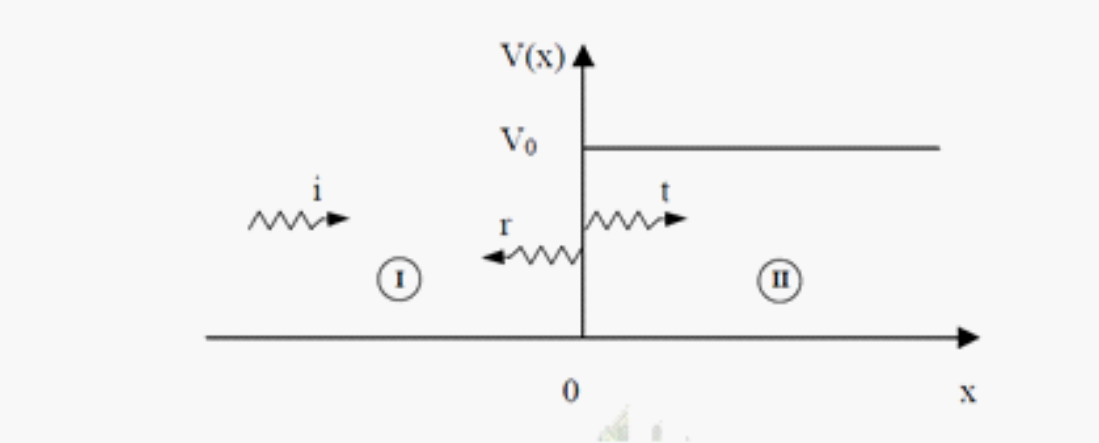
Ou p et $\overrightarrow{j}$ sont donnés par :

$$p=\psi^{*}\psi=|\psi|^{2} \tag{1.7}$$

$$\overrightarrow{j}=-\frac{i}{2m}\left(\psi^{*}\overrightarrow{\nabla^{2}}\psi-\psi\overrightarrow{\nabla}\psi^{*}\right) \tag{1.8}$$

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

Marche de potentiel :



soit une particule incidente 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, $\psi(x,t)=\varphi(x)e^{-iwt}$ décrivant l'état de la particule obéit à l'équation de Schrödinger.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^{2}}{2m}\triangle\psi(x,t)+V(x)\psi(x,t) \tag{1.9}$$

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

$$\hbar\omega\varphi(x)=-\frac{\hbar^{2}}{2m}\triangle\varphi(x)+V(x)\varphi(x) \tag{1.10}$$

Ou encore :

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x) = 0. \tag{1.11}$$

Les solutions stationnaires de l'équation de la particule son comportement sera différent, nous considérerons donc plusieurs cas :

A) Cas ou $\mathbf{E > V_0}$: réflexion partielle

$$\varphi_I(x) = Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} \tag{1.12}$$

avec

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \tag{1.13}$$

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

$$\varphi_{II}(x) = Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x} \tag{1.14}$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) \tag{1.15}$$

si l'on considère que la particule n'est pas 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(1.14)et (1.16) deviennent :

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0), \text{ soit } A + A' = B \tag{1.16}$$

$$\frac{d\varphi_I(0)}{dx} = \frac{d\varphi_{II}(0)}{dx}, \text{ soit } k_1A - k_1A' = k_2B \tag{1.17}$$

Les équations(1.17) et (1.18) nous permettent de calculer les rapports :

$$\frac{A'}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} et \frac{B}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \tag{1.18}$$

En reprenant les expressions des coefficients de réflexion et transmission à l'interface, nous obtenons pour la marche de potentiel en tenant compte des équations(1.14) :

$$R = \left|\frac{A'}{A}\right|^2 = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2 \tag{1.19}$$

$$T = \frac{k_2}{k_1}\frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \tag{1.20}$$

On vérifie bien$R + T = 1$.

Remarques :

-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 montrent l'équation (1.19) (rapportes d'amplitudes réels).

-Si E est très grand devant V_0, $k_1 \approx K_2$ et on retrouve $T \approx 1$.

B) Cas ou $\mathbf{E > V_0}$: réflexion totale.

Reprenons les équations (1.16) et (1.17). comme cette fois $V_0 > E$, on peut écrire $k_2 = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} = i\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$,et l'équation (1.16) devient :

$$\varphi_{II}(x) = Be^{-p_2x} + B^{'}e^{p_2x} \tag{1.21}$$

avec

$$p^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) \text{ réel positif} \tag{1.22}$$

pour que l'équation reste bornée. Il convient que $B' = 0$ puisque $x > 0$ dans cette région La condition de raccordement l'équation (1.17) ne change pas et l'équation (1.18) devient alors :

$$ik_1A - ik_1A' = -p_2B \tag{1.23}$$

et la combinaison des équations(1.25) et(1.17) nous donne les nouveaux rapports d'amplitudes :

$$\frac{A'}{A} = \frac{k_1 - ip_2}{k_1 + ip_2} \text{ et } \frac{B}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + ip_2} \tag{1.24}$$

ce qui conduit au facteur de réflexion :

$$\left|\frac{A'}{A}\right|^2 = \left|\frac{k_1 - ip_2}{k_1 + ip_2}\right|^2 = 1 \tag{1.25}$$

On retrouve le résultat donne par mécanique classique, la particule est toujours

réfléchie[2].

1.2 Théorie de Klein-Gordon

On utilise les matrices σ^i de Pauli dont les définitions sont[6]

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Le quadri-gradient est défini par

$$\partial_\mu = \left(\partial_t, \overrightarrow{\nabla}\right)$$

et le quadri-opérateur d'impulsion est

$$p_\mu = i\partial_\mu.$$

Ainsi l'opérateur d'impulsion s'écrit

$$\overrightarrow{p} = -i\overrightarrow{\nabla}.$$

On note le quadrivecteur d'onde k^μ par

$$k^\mu = \left(E, \overrightarrow{k}\right)$$

Où E est l'énergie $\overrightarrow{k}$ et le vecteur d'onde. Lorsque l'on écrit $\overrightarrow{a}$, on fait référence à un vecteur

$$\overrightarrow{a} = \left(a^1, a^2, a^3\right).$$

Quand on utilise la métrique de Minkowski, on prend la convention

[2] -Une différence importante par rapport à la mécanique classique est l'introduction du terme $e^{-p_2 x}$, onde évanescente, qui montre que la particule a une probabilité de présence non nulle dans la région **II**. Cette probabilité peut être généralement considérée comme négligeable lorsque $x > 1/p_2$, profondeur de pénétration ou portée de l'onde évanescente.

-La particule, en pénétrant la région $x > 0$, subit un retard exprimé par un déphasage à la réfléxion, d'ou le terme imaginaire du rappot d'amplitudes A'/A, analogue au déphasage introduit par réflexions sur un milieu métallique.

-Si $V_0 \to \infty$, $p_{2\to\infty}, A' \to A$ et $B \to 0$. La portée de l'onde dans la région II tends vers 0.

$$\eta^{\mu\nu} = diag\,(1, -1, -1, -1)$$

Equation de Klein - Gordon et courant conservé

Soit $\phi\,(x)$ un champ scalaire. L'équation de Klein-Gordon est celle qui décrit les particules de spin 0. Elle est donnée par

avec $\Box = \partial_\mu \partial^\mu$. Cette équation est manifestement covariante étant donné que l'opérateur $\Box$ est invariant et que le champ ϕ est scalaire. Il existe un courant conservé j^μ par les champs vérifiant l'équation de Klein - Gordon. En effet, en posant

$$j^\mu = \frac{i}{2m}\left(\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^*\right) \tag{1.26}$$

on voit que

$$\partial_\mu j^\mu = \frac{i}{2m}\left(\partial_\mu \phi^* \partial^\mu \phi + \phi^* \Box \phi - \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi^* - \phi \Box \phi^*\right) = \frac{i}{2m}\left(\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^*\right) = 0 \tag{1.27}$$

où l'on a utilisé l'équation de Klein - Gordon pour la dernière égalité. En posant $j^0 = \rho$, on en déduit facilement que

$$\frac{d}{dt}\int_v \rho dV = \int_s \overrightarrow{j}.\overrightarrow{ds} = 0$$

en supposant que les champs soient locaux. Ainsi, comme en mécanique quantique non relativiste, on aurait envie d'interpréter $1/2$ comme une densité de probabilité à une particule. Toutefois, on peut très vite se rendre compte qu'on rencontre des problèmes avec une telle interprétation directe.

En effet, si l'on considère une onde plane $\phi(x) = exp(i\overrightarrow{p}.\overrightarrow{x} - iEt)$, l'équation de Klein-Gordon implique immédiatement que

$$E^2 = \overrightarrow{p^2} + m^2 \tag{1.28}$$

et donc $E = \pm\sqrt{\overrightarrow{p}^2 + m^2}$. De plus, le calcul du courant sur cette onde plane donne

$$j^{\mu}\left(\frac{E}{m},\frac{\overrightarrow{p}}{m}\right)=\frac{p^{\mu}}{m}, \tag{1.29}$$

et donc $\rho = E/m$ peut être soit positif, soit négatif, dépendant du signe de l'énergie. Une densité de probabilité négative semble évidemment insatisfaisante. On verra par le suite que l'introduction des antiparticules lève ce problème.

Solution libres

Nous avons développé jusque là une théorie libre, c'est à dire ne faisant intervenir aucune interaction. On verra plus loin comment introduire l'interaction électromagnétique dans cette équation. Pour le moment, on va s'intéresser aux solutions de l'équation libre(**??**). Pour ce faire, on va passer dans l'espace de Fourier. La transformée de Fourier de $\phi(x)$ est définie par

$$\widetilde{\phi}\left(k,t\right)=\int\frac{1}{\left(2\pi\right)^{4}}\phi\left(x,t\right)e^{ik_{\mu}x^{\mu}}d^{4}x, \tag{1.30}$$

son inverse de fourie est donc

$$\phi\left(x,t\right)=\int\frac{d^{4}k}{\left(2\pi\right)^{4}}\widetilde{\phi}\left(k,t\right)e^{-ik_{\mu}x^{\mu}}. \tag{1.31}$$

En utilisant la représentation de l'équation(1.32) pour $\phi\left(x\right)$ et en appliquant l'équation(**??**), on trouve que

$$k_{\mu}k^{\mu}=k^{2}=m^{2} \tag{1.32}$$

Cette équation fixe l'énergie de l'onde car elle donne $E=\pm\sqrt{\overrightarrow{k}+m^{2}}$. L'introduction de cette contrainte peut se faire de manière naturelle en modifiant l'équation (1.32). On écrit alors

$$\phi\left(x,t\right)=\int\frac{d^{4}k}{\left(2\pi\right)^{4}}\widetilde{\phi}\left(k,t\right)e^{-ik_{\mu}x^{\mu}}\left(2\pi\right)\delta\left(k^{2}-m^{2}\right) \tag{1.33}$$

où le facteur 2π est introduit par souci de normalisation de la fonction δ. En utilisant le fait que cette fonction δ peut s'écrire de manière plus agréable comme

$$\delta(k^{2}-m^{2})=\frac{1}{2E}\left(\delta\left(k_{0}-E_{+}\right)+\delta\left(k_{0}-E_{-}\right)\right). \tag{1.34}$$

où l'on a défini $E = |E_{\pm}|$. La fonction ϕ solution de l'équation de Klein - Gordon peut alors s'écrire sous la forme générale

$$\phi(x,t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 .2E} \left[a\left(\overrightarrow{k}\right) e^{i\left(\overrightarrow{k}.\overrightarrow{x}-Et\right)} + b\left(\overrightarrow{k}\right) e^{i\left(\overrightarrow{k}.\overrightarrow{x}+Et\right)} \right] \tag{1.35}$$

où les fonctions $a\left(\overrightarrow{k}\right)$, $b\left(\overrightarrow{k}\right)$ sont deux fonctions indépendantes, vu que le champ est complexe. Si le champ était réel $a\left(\overrightarrow{k}\right)$, $b^*\left(\overrightarrow{k}\right)$, seraient identifiés. A ce stade, il est très important de remarquer que la fonction ϕ comprend une superposition d'onde d'énergies positives et d'ondes d'énergies négatives.

Intéraction électromagnétique

On aimerait maintenant pouvoir généraliser l'équation(**??**) en introduisant l'interaction de la fonction ϕ avec un champ électromagnétique. On sait de la physique quantique traditionnelle qu'en présence d'un potentiel externe $A^\mu = \left(A^0, \overrightarrow{A}\right)$ le moment canonique $p_\mu = i\partial_\mu$ devient $i\left(\partial_\mu + iqA_\mu\right)$ où q est la charge de la particule représentée par la fonction ϕ. On définit alors la dérivée covariante comme

$$D_\mu = \partial_\mu + iqA_\mu \tag{1.36}$$

et on généralise l'équation de Klein-Gordon en remplaçant ∂_μ par D_μ. On a ainsi

$$\left(D_\mu D^\mu + m^2\right)\phi(x) = 0. \tag{1.37}$$

On peut facilement voir que le courant conservé associé à cette équation s'obtient en remplaçant ∂_μ par $D_\mu$dans l'ancien courant. Ce qui s'écrit

$$j^\mu = \frac{i}{2m}\left(\phi^* D^\mu \phi - \phi\left(D^\mu \phi\right)^*\right), \tag{1.38}$$

avec $\partial_\mu\ j^\mu = 0$. Ainsi, la densité de probabilité $j^0 = \rho$ associée est :

$$\rho = \frac{i}{2m}\left(\phi^*\left(\partial_t + iqA_\mu\right)\phi - \phi\left(\partial_t + iqA_\mu\right)\phi^*\right). \tag{1.39}$$

Comme il est évident que D_μ se transforme comme un quadrivecteur, la nouvelle équation est manifestement covariante sous transformation de Lorentz. On pourrait également montrer que la parité, le renversement temporel et les transformations de jauge sont des symétries

de cette équation.

Limite non relativiste

Il est possible de définir une limite non-relativiste de l'équation(1.38) de Klein - Gordon. Il existe essentiellement deux méthodes pour y arriver. La première est une procédure, due à **Foldy-Wouthuysen**, de développement systématique dans des puissances inverses de la masse qui mène à une expression en série entière du Hamiltonien final. Cette méthode est très calculatoire, mais a l'avantage d'être systématique. Il existe une autre méthode moins systématique, mais plus simple, qui permet d'obtenir facilement les premiers termes du développement. C'est cette dernière méthode qui est présentée ici. On commence par remarquer que l'équation de Klein - Gordon peut se mettre sous la forme

$$\left[i\partial_t - qA_0\right]^2 \phi\left(x\right) = \left[m^2 + \left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2\right] \phi\left(x\right) \tag{1.40}$$

où $p^i = -i\frac{\partial}{\partial x^i}$.L'équation étant du deuxième degré en temps, on sait qu'il est possible de la découpler en deux équations du premier degré. On définit $\varphi = \phi$ et $\xi = \frac{i}{m}\left(\partial_t + iqA_0\right)\phi$ l'équation(1.41) mène à

$$i\left(\partial_t + iqA_0\right)\varphi = m\xi \tag{1.41}$$

Enfin, on crée des combinaisons linéaires en définissant que$\varphi = \theta_* + \chi_*$ et $\xi = \theta_* - \chi_*$, ou $\theta_* et\ \chi_*$sont deux fonctions, puis on introduit le vecteur $\Psi\left(x\right) = \left(\theta_*,\ \chi_*\right)$. On peut alors écrire ce système sous forme d'une équation de Schrödinger :

$$i\partial_t \Psi_a\left(x\right) = H_{ab}\Psi_b\left(x\right)$$

où $a, b = 1, 2$et le Hamitonien est

$$\begin{pmatrix} \left[m + \frac{\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2}{2m} + qA_0\right] & \frac{\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2}{2m} \\ -\frac{\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2}{2m} & -\left[m + \frac{\left(\overrightarrow{P} - q\overrightarrow{A}\right)^2}{2m}\right] + qA_0 \end{pmatrix} \tag{1.42}$$

On explicite finalement le système pour trouver

$$i\partial_t\theta_* = \left[m + \frac{\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2}{2m} + qA_0\right]\theta_* + \frac{\left(\overrightarrow{P} - q\overrightarrow{A}\right)^2}{2m}\chi_* \tag{1.43}$$

$$i\partial_t\chi_* = -\left[m + \frac{\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2}{2m} - qA_0\right]\chi_* - \frac{\left(\overrightarrow{P} - q\overrightarrow{A}\right)^2}{2m}\theta_* \tag{1.44}$$

A partir de ces expressions, la limite non relativiste peut être obtenue moyennant quelques calculs. Tout d'abord, on va commencer par se débarrasser de la dérivée temporelle. On écrit donc que $\psi(x,t) = exp[-iEt]\,\psi_{nr}(x)$ avec $E = m + \varepsilon$ et$\psi_{nr}(x) = (\theta(x), \chi(x))$. les inconnues du problème sont maintenant les fonctions χ, θ ainsi que l'énergie ε. Avec ces nouvelles définitions, on aboutit au système

$$(m+\varepsilon)\,\theta = \left[m + \frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{2m} + qA_0\right]\theta + \frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{2m}\chi \tag{1.45}$$

$$(m+\varepsilon)\,\chi = -\left[m + \frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{2m} - qA_0\right]\chi - \frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{2m}\theta \tag{1.46}$$

où l'on a défini $\overrightarrow{\Pi} = \overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}$. La limite non-relativiste consiste à dire que l'énergie " est petite devant la masse, que les champs ϕ et A sont faibles par rapport à la masse et que la variation spatiale des quantités est faible. En passant dans l'espace de Fourier, tous les opérateurs présents dans les équations(1.48) et (1.49)deviennent des nombres. On peut ainsi résumer nos hypothèses par $\varepsilon << m, |A_0| << m$, $\left|\overrightarrow{A}\right| << m$ et $|\overrightarrow{p}| << m$,ce qui entraîne $\left|\overrightarrow{\Pi}\right| << m$,

Sans passer dans l'espace de Fourier, on va travailler avec l'opérateur $\overrightarrow{\Pi}$ comme un nombre et on le réinterprétera et comme un opérateur à la fin du calcul. Comme à partir de maintenant ce sera toujours le cas, on ne mentionnera plus la subtilité. Le but est maintenant de trouver des équations pour nos quantités, en allant à l'ordre $1/m^4$ au maximum. En rappelant qu'au premier ordre $1/(1+x) \simeq 1 - x$,

$$\chi = -\frac{1}{2m}\left(1 + \frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{2m^2} + \frac{qA_0}{2m} - \frac{\varepsilon}{m}\right)\frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{2m}\theta, \tag{1.47}$$

et on pourrait vérifier par la suite qu'il ne sert à rien de développer à un ordre plus élevé

pour cette équation. En remplaçant dans l'équation(1.48) on trouve

$$\varepsilon\left(1-\frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{16m^4}\right)\theta=\left(\frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{2m}-\frac{\overrightarrow{\Pi^4}}{8m^3}+qA_0-\frac{\overrightarrow{\Pi^2}qA_0\overrightarrow{\Pi^2}}{16m^4}\right) \tag{1.48}$$

Pour respecter la physique, on cherche une fonction qui soit proprement normée. La densité de probabilité p donnée par l'équation(1.24) peut s'exprimer dans les nouvelles variables comme $\rho=(\theta^*\theta-\chi^*\chi)$. Les conditions de normalisations étant que $\int \rho d\ ^3x=1$, on doit avoir que $\int(\theta^*\theta-\chi^*\chi)\,d\ ^3x=1$. Mais comme $\chi\simeq-\frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{4m^2}$ il vient

$$\int\theta^*\left(1-\frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{16m^4}\right)\theta d^3x=1. \tag{1.49}$$

.

On définit alors

$$\widetilde{\theta}=\left(1-\frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{32m^4}\right)\theta\Leftrightarrow\theta=\left(1+\frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{32m^4}\right)\widetilde{\theta} \tag{1.50}$$

où la dernière relation est vraie à l'ordre $1/m^4$ seulement. La fonction $\widetilde{\theta}$ est proprement normée et c'est donc l'état physique cherché. En remplaçant dans l'équation(1.51) et après quelques manipulations, on arrive à

$$\varepsilon\widetilde{\theta}=\left(\frac{\overrightarrow{\Pi^2}}{2m}-\frac{\overrightarrow{\Pi^4}}{8m^3}+qA_0+\frac{\overrightarrow{\Pi^4}qA_0}{32m^4}+\frac{qA_0\overrightarrow{\Pi^4}}{32m^4}-\frac{\overrightarrow{\Pi^2}qA_0\overrightarrow{\Pi^2}}{16m^4}\right)\widetilde{\theta}. \tag{1.51}$$

En remarquant finalement que

$$\left[\overrightarrow{\Pi^2},\left[\overrightarrow{\Pi}^2,A_0\right]\right]=\overrightarrow{\Pi^4}A_0+A_0\overrightarrow{\Pi^4}-2\overrightarrow{\Pi^2}A_0\overrightarrow{\Pi^2} \tag{1.52}$$

et en se rappelant la définition de $\overrightarrow{\Pi}$, il faut résoudre $\widetilde{H}\ \widetilde{\theta}=\varepsilon\widetilde{\theta}$ avec

$$\widetilde{H}=\frac{\left(\overrightarrow{p}-q\overrightarrow{A}\right)^2}{2m}-\frac{\left(\overrightarrow{p}-q\overrightarrow{A}\right)^4}{8m^3}+qA_0+\frac{1}{32m^4}\left[\left(\overrightarrow{p}-q\overrightarrow{A}\right)^2,\left[\left(\overrightarrow{p}-q\overrightarrow{A}\right)^2,qA_0\right]\right]. \tag{1.53}$$

Le premier terme est l'énergie cinétique non relativiste et le deuxième est la première correction relativiste. Le troisième terme est simplement l'énergie potentielle tandis que le dernier terme est un effet purement quantique. On pourrait en effet montrer que ce terme

est lié au *Zitterbewegung*, effet de tremblement de la trajectoire que l'on étudiera plus loin. Notons finalement que ce qui nous intéresse en général, ce n'est pas tant les fonctions d'ondes d'un système mais plutôt son spectre. Ainsi, pour ce qui nous intéresse, il nous suffit de déterminer le spectre de $\widetilde{H}$.

Atomes mésoniques

Des atomes de spin zéro peuvent exister dans la nature quand un π^-ou un K^- est capturé par un noyau. On peut calculer approximativement le spectre de ces systèmes en utilisant la formule trouvée pour $\widehat{H}$. Dans ce problème, le champ magnétique est nul et le potentiel est Coulombien. On prend donc $\overrightarrow{A} = 0$ et $qA_0 = -\frac{Z\alpha}{r}$ avec Z le nombre de protons et on rappelle que $\alpha = 1/137$. Il faut alors résoudre le spectre de

$$\widetilde{H} = \frac{\overrightarrow{p^2}}{2m} - \frac{Z\alpha}{r} - \frac{\overrightarrow{p^4}}{8m^3} + \frac{1}{32m^4}[\overrightarrow{p^2}, [\overrightarrow{p^2}, qA_0]], \tag{1.54}$$

Le spectre de H_0 est connu car c'est celui de l'atome d'hydrogène avec $Z \neq 1$

Il est donné par

$$E_n = -\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2}m, \tag{1.55}$$

avec :

$$H_0\Psi_n(\overrightarrow{r}) = (-\frac{\overrightarrow{p^2}}{2m} - \frac{Z\alpha}{r})\Psi n(\overrightarrow{r}) = E_n\Psi_n(\overrightarrow{r}) \tag{1.56}$$

On va alors traiter les deux termes différents de H_0 en perturbation. Mais,

$$\frac{\overrightarrow{P^4}}{8m^3}\Psi_n(\overrightarrow{r}) = \frac{1}{2m}\left(E_n + \frac{Z\alpha}{r}\right)\Psi_n(\overrightarrow{r}) = \frac{1}{2m}(m^2\frac{Z^4\alpha^4}{4n^2} - m\frac{Z^3\alpha^3}{n^2r} + \frac{Z^3\alpha^2}{r^2})\Psi_n(\overrightarrow{r}) \tag{1.57}$$

et l'on sait de l'atome d'hydrogène que

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle = m\frac{Z\alpha}{n^2}, \left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle = m^2\frac{Z^2\alpha^2}{n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)}, \tag{1.58}$$

où $\langle . \rangle$ signifie la moyenne sur l'étatΨ_n. On arrive donc à

$$\left\langle\frac{\overrightarrow{P^4}}{8m^3}\right\rangle = \frac{mZ^4\alpha^4}{2n^3}\left(\frac{1}{1+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right). \tag{1.59}$$

En utilisant le fait que $\nabla^2\frac{1}{r} = -4\pi\delta(\overrightarrow{r})$, on voit que $[\overrightarrow{p^2}, qA_0] = -4\pi\alpha\delta(\overrightarrow{r})$.

Donc,

$$\left\langle \left| \overrightarrow{p^2}, [\overrightarrow{p^2}, qA_0]] \right| \right\rangle + 4\pi z\alpha \int \delta\left(\overrightarrow{r}\right)\left((\nabla^2\Psi_n^*\left(\overrightarrow{r}\right))\Psi_n\left(\overrightarrow{r}\right) - \Psi_n^*\left(\overrightarrow{r}\right)\nabla^2\Psi_n\left(\overrightarrow{r}\right)d^3r = 0. \quad (1.60)$$

Il n'y a ainsi pas de contribution du *Zitterbewegung*. Finalement, le spectre de $\widetilde{H}$, qui est la correction à l'énergie de masse, s'écrit

$$\varepsilon_{nl} = -m\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2}[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n^2}(\frac{n}{1+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}) + ...] \quad (1.61)$$

On observe que le terme en $\overrightarrow{p^4}$ agit comme un terme de structure fine vu qu'il lève la dégénérescence en l de l'atome d'hydrogène. Il existe également une solution exacte à ce problème, qu'on peut obtenir en écrivant l'équation stationnaire de Klein - Gordon :

$$((E + \frac{Z\alpha}{r})^2 + \nabla^2 - m^2)\Psi\left(\overrightarrow{r}\right) = 0. \quad (1.62)$$

Comme le problème est à symétrie sphérique, l'idée est de partir comme usuellement avec des fonctions dont la dépendance angulaire et la dépendance en r sont découplées. Moyennant quelques identifications, on peut se ramener à l'équation de l'atome d'hydrogène mais avec un nouveau l qui devient continu. On prolonge ensuite analytiquement la solution de l'atome d'hydrogène pour obtenir une expression exacte de l'énergie E. Les calculs détaillés sont donnent

$$E = m\left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left(n - l - \frac{1}{2} + \sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2}\right)^2}\right]^{-1/2} \quad (1.63)$$

Dans le développement perturbatif nous avions supposé que l'énergie cinétique était petite, ce qui s'écrit $\overrightarrow{p^2}/2m << 1$. On peut alors se demander quelle quantité doit être petite ici afin de retrouver le développement perturbatif. Le théorème du viriel nous donne, $\langle v\rangle = -2\langle T\rangle i$, où T est l'énergie cinétique, tandis que l'équation(1.61) nous permet d'affirmer que $\langle v\rangle \sim -mZ^2\alpha^2$.On voit donc que $\overrightarrow{p^2}/2m \sim -mZ^2\alpha^2$ ce qui implique qu'il faut développer la solution dans le petit paramètre $Z^2\alpha^2$, ce qui est cohérent avec la limite non relativiste où on avait supposé que$|qA_0| << m$. En effectuant le développement, on peut voir que l'on retrouve immédiatement la solution perturbative.

On peut enfin se demander si la formule que nous avons trouvée est cohérente. En étudiant l'état fondamentle ($n = 1$, $l = 0$) on voit que les énergies deviennent complexes à partir

de$Z = 69$, car $\alpha = 1/137$. A partir de $Z = 69$ on peut écrire l'énergie comme $E = E_0 + i\Gamma/2$ et l'état propre prend la forme générale

$$\Psi\left(\overrightarrow{r}\right) = e^{iEt}\phi\left(\overrightarrow{r}\right) = e^{iEt-\frac{\Gamma}{2}t}\phi\left(\overrightarrow{r}\right). \tag{1.64}$$

Si l'on suppose que $\Psi\left(\overrightarrow{r}\right)$ est normé au temps $t = 0$, on a alors $\int \left|\phi\left(\overrightarrow{r}\right)\right|^2 d\ ^3r = 1$, et donc au temps t la probabilité totale d'observer l'état Ψest

$$p = \int |\Psi|^2 d^3r = e^{-\Gamma t}. \tag{1.65}$$

Des énergies complexes représentent alors le fait que l'état n'est pas stable et qu'il se désintègre avec un temps de vie $\tau = 1/\Gamma$. Ces résultats sont tout à fait similaires à la théorie des états métastables de l'approximation semi classique de la physique quantique non relativiste. Notre théorie prédit ainsi que les atomes mésoniques sont instables à partir de $Z = 69$. Remarquons que, à partir de $Z = 69$, $\langle v\rangle \sim -m$ et que les phénomènes de créations de paires ne peuvent être négligés. Il se trouve que l'on a pu observer des atomes mésoniques assez stables ayant Z=82 ou encore $Z = 92$. Cette théorie n'est donc pas parfaite et devrait être modifiée. Un petit calcul simple montre que pour un méson π le rayon de Bohr vaut 2.8 fm à $Z = 69$, alors que le rayon du noyau est $R = 1.2.A^{1/3} = 5fm$. En d'autres termes, un modèle de noyau ponctuel ne pourra jamais donner un bon résultat. Il faudrait alors modifier notre modèle en travaillant avec la masse réduite et non la masse, ou encore prendre en compte que le noyau n'est pas ponctuel, ainsi que considérer les phénomènes de créations de paires etc..

Zitterbewegung.

Il existe un effet quantique remarquable contenu dans l'équation de Klein - Gordon qui donne lieu à un tremblement de la particule libre sur la trajectoire, ou *Zitterbewegung*. La manière la plus commune d'exhiber cet effet est de calculer directement la position moyenne d'un paquet d'ondes et de montrer qu'on trouve une fluctuation de la trajectoire de l'ordre de $1/m$. *Le Zitterbewegung* peut également être mis en avant à l'aide d'une explicitation purement algébrique de l'opérateur position en faisant intervenir le point de vue de Heisenberg de la mécanique quantique. Soit $A(t)$ un opérateur dans la vision de Heisenberg, relié

à l'opérateur A indépendant du temps de la vision de Schrödinger par la relation

$$A\left(t\right)=e^{iHt}Ae^{-iHt} \tag{1.66}$$

où l'on a supposé que le Hamiltonien est indépendant du temps. La dérivée de l'opérateur $A\left(t\right)$ peut s'écrire comme

$$\frac{dA(t)}{dt}=i\left[H,A(t)\right]+\frac{\partial A(t)}{\partial t} \tag{1.67}$$

Revenons maintenant au problème physique. Si l'on suppose, dans la formulation à deux composantes, que la particule est libre alors le Hamiltonien de l'équation(1.45) prend la forme

$$H=\frac{\overrightarrow{p^2}}{2m}\left(\sigma^3+i\sigma^2\right)+m\sigma^3 \tag{1.68}$$

où les σ^i sont les matrices de Pauli. L'opérateur vitesse de la particule s'exprime comme

$$\overrightarrow{v}(t)=\frac{d\overrightarrow{x}(t)}{dt}=i\left[H,\overrightarrow{x}(t)\right]=\left(\sigma^3(t)+i\sigma^2(t)\right)\frac{\overrightarrow{p}(t)}{m}. \tag{1.69}$$

En remarquant que

$$H\overrightarrow{v}(t)+\overrightarrow{v}(t)H=2\overrightarrow{p} \tag{1.70}$$

On obtient que

$$\frac{d\overrightarrow{v}(t)}{dt}=i\left[H,\overrightarrow{v}(t)\right]=i\left(H\right)\overrightarrow{v}(t)+\overrightarrow{v}(t)H)-2i\overrightarrow{v}(t)H=2i\overrightarrow{p}-2i\overrightarrow{v}(t)H. \tag{1.71}$$

On note $\overrightarrow{v}_0=\overrightarrow{v}(t=0)$, et on pose $\overrightarrow{\alpha}(t)=\overrightarrow{p}H^{-1}+(\overrightarrow{v}_0-\overrightarrow{p}H^{-1})\mathrm{e}^{-2iHt}$. En voyant que l'équation (1.73) peut s'écrire

$$H(\overrightarrow{v}-\overrightarrow{p}H^{-1})=-(\overrightarrow{v}-\overrightarrow{p}H^{-1})H \tag{1.72}$$

car $[\overrightarrow{p},H]=0$, et comme $[H,\overrightarrow{\alpha}(t)]=0$ on a

$$\begin{aligned}\frac{d\overrightarrow{\alpha}(t)}{dt} &= \left(\overrightarrow{v}_0-\overrightarrow{p}H^{-1}\right)e^{-2iHt}\left(-2iH\right)=e^{iHt}(\overrightarrow{v}_0-\overrightarrow{p}H^{-1})e^{-iHt}\left(-2iH\right) \\ &= 2i\overrightarrow{p}-2i\overrightarrow{v}(t)H.\end{aligned} \tag{1.73}$$

De plus, comme $\overrightarrow{\alpha}\,(t=0)=\overrightarrow{v_0}$, on doit forcément avoir

$$\overrightarrow{v}(t)=\overrightarrow{\alpha}(t)=\overrightarrow{p}H^{-1}+(\overrightarrow{v}_0-\overrightarrow{p}H^{-1})e^{-2iHt}. \tag{1.74}$$

En posant $\overrightarrow{x}\,(t=0)=\overrightarrow{x_0}$ et en notant symboliquement $H^{-1}=1/H$, une simple intégration de cette dernière expression mène à

$$\overrightarrow{x}(t)=\overrightarrow{x_0}+\frac{\overrightarrow{p}t}{H}-\left(\overrightarrow{v}_0-\frac{\overrightarrow{p}}{H}\right)\frac{e^{-iHt}-1}{2iH}. \tag{1.75}$$

On voit alors que l'opérateur position est composé d'une partie de translation à vitesse constante ainsi que d'une partie oscillante, le Zitterbewegung. Il est à ce stade possible de calculer la moyenne de cet opérateur position sur un paquet d'ondes afin de retrouver la formule usuellement énoncée. Ce calcul est également instructif d'un autre point de vue, car on va se rendre compte que le calcul de moyennes d'opérateurs est un peu plus subtil qu'en mécanique quantique traditionnel. On pose $\Psi=(\theta_{*,}\chi_*)$, comme à la section1.4. On peut alors exprimer la densité de probabilité comme $\rho=|\theta_*|^2-|\chi_*|^2=\Psi^+\sigma^3\Psi$. On voit donc que le produit scalaire usuel doit être modifié en insérant une matrice σ^3 afin que la normalisation $\int\rho d^3r=1$ soit valable. Ainsi, dans la formulation à deux composantes, la moyenne d'un opérateur A s'exprime comme

$$\langle A\rangle=\langle\Psi\,|A|\,\Psi\rangle=\int\Psi^+\sigma^3A\Psi d^3r. \tag{1.76}$$

En revenant aux définitions des fonctions θ_* et χ_* de la section 1.4, on voit qu'en terme de la fonction d'onde ϕ à une composante Ψ s'écrit

$$\begin{aligned}\Psi\,(x) &= \frac{1}{2}\,(\phi(x)+\frac{i}{m}\partial_t\phi(x \\ \Psi\,(x) &= \frac{1}{2}\,(\phi(x)-\frac{i}{m}\partial_t\phi(x\end{aligned} \tag{1.77}$$

vu que $A_0=0$. Lors de l'étude des solutions libres, on a vu qu'on peut écrire $\phi(x)$ comme

$$\phi(x,t)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{m}{E}}\left|a^+_{\overrightarrow{k}}e^{i\left(\overrightarrow{k}.\overrightarrow{x}-Et\right)}+a^-_{\overrightarrow{k}}e^{i\left(\overrightarrow{k}.\overrightarrow{x}-Et\right)}\right| \tag{1.78}$$

où l'on a redéfini les coefficients devant les exponentielles et on rappelle que

$E = \sqrt{\overrightarrow{p^2} + m^2}$ .En définissant

$$\chi^{\sigma}\left(\overrightarrow{k}\right) = \frac{1}{2\sqrt{mE}} \begin{pmatrix} m + \sigma E \\ m - \sigma E \end{pmatrix} \tag{1.79}$$

où $\sigma = \pm 1$,Ψdevient alors

$$\Psi\left(x,t\right) = \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3k}{\left(2\pi\right)^3} e^{i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{x}} a^{\sigma}_{\overrightarrow{k}}(t)\chi^{\sigma}(\overrightarrow{k}), \tag{1.80}$$

où $a^{\sigma}_{\overrightarrow{k}}(t)$ signifie que la dépendance temporelle se trouve dans les fonctions $a^{\sigma}_{\overrightarrow{k}}$ $\langle x(t)\rangle$. Si l'on veut calculer la moyenne$\langle x(t)\rangle$ il faut se placer en représentation

de Heisenberg. L'évolution temporelle devant se trouver dans les opérateurs, on se place en t=0 pour calculer la moyenne de $\overrightarrow{x}(t)$. En utilisant la définition l'équation (1.79) sur la fonction $\Psi(x) = \Psi(x, t = 0)$ ainsi que l'équation(1.72) et le fait que

$\left(\chi^{\sigma}\right)^{+} \sigma^{3\chi^{\sigma^*}} = \sigma\delta_{\sigma,\,\sigma^*}$ le calcul donnerait

$$\begin{aligned} \left\langle \Psi(x) \left| \overrightarrow{x(t)} \right| \Psi(x) \right\rangle &= |\overrightarrow{x_0}| + \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{\left(2\pi\right)^3} \frac{\overrightarrow{k}}{E} t\sigma \left| a^{\sigma}_{\overrightarrow{k}}(t) \right|^2 \\ &\quad + 2 \int \frac{d^3k}{\left(2\pi\right)^3} \frac{\overrightarrow{k}}{E^2} \sin\left(Et\right) R \left| a^{-*}_{\overrightarrow{k}} a^{+*}_{\overrightarrow{k}} e^{-iEt} \right| \end{aligned} \tag{1.81}$$

Si on avait opté pour la vision de Schrödinger, nous aurions également pu calculer la moyenne de l'opérateur $\overrightarrow{x}$. Un long calcul nous aurait alors mené à

$$\left\langle \Psi(x,t) \left| \overrightarrow{x} \right| \Psi(x,t) \right\rangle = \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{\left(2\pi\right)^3} \frac{\overrightarrow{k}}{E} t\sigma \left| a^{\sigma}_{\overrightarrow{k}}(t) \right|^2 - R\left[i \int \frac{d^3k}{\left(2\pi\right)^3} \frac{\overrightarrow{k}}{E^2} a^{+*}_{\overrightarrow{k}}(t) a^{-*}_{\overrightarrow{k}}(t) \right] \tag{1.82}$$

On peut évidemment montrer que la moyenne de$\overrightarrow{x}\,(t)$ calculée dans la vision de Heisenberg ou dans la vision de Schrödinger est identique. La première composante de cette moyenne est simplement le mouvement à vitesse uniforme du paquet. La deuxième composante de l'équation (1.85) est par contre telle que

$$a^{+*}_{\overrightarrow{k}}(t) a^{-*}_{\overrightarrow{k}}(t) \sim e^{2iEt} \tag{1.83}$$

et représente ainsi une oscillation δx très rapide($\omega \geq 2m$) de la position de la particule autour de la position centrale. Ce mouvement d'oscillation est clairement dû aux interférences

entre les parties à énergies positives et les parties à énergies négatives. De plus, on voit facilement que $\delta x \sim 1/m$.

Antiparticules

Afin de se rendre compte que l'équation de Klein - Gordon contient effectivement la description de particules et d'antiparticules, le plus simple est de prendre un exemple dans lequel on voit la nécessité d'interpréter la présence d'antiparticules. Soit une particule de Klein - Gordon de masse m, charge e et énergie $E = \sqrt{\overrightarrow{p^2} + m^2}$ incidente sur une marche de potentiel

$$V(x) = V_0 \theta(x) = eA^0(x) \tag{1.84}$$

On a vu à l'équation (1.81) que la solution libre était composée de deux paquets d'ondes, un avec énergies positives et un avec énergies négatives. Nous allons considérer que la particule incidente sur le potentiel a une énergie positive. La solution peut alors s'écrire comme

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \{e^{ikx} + ae^{-ikx} \quad \text{si} \quad x < 0 \quad k = \sqrt{E^2 - m^2} \\ \{be^{iqx} \quad &\text{si} \quad x > \quad q = \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2} \end{aligned} \tag{1.85}$$

Comme habituellement, il faut maintenant imposer que ϕ et sa dérivée sont continues en 0, ce qui permet de résoudre le système pour les coefficients a et b. Les coefficients de transmission et de réflexion peuvent alors se calculer et valent

$$T = \frac{q}{k}\left|b^2\right| = \frac{4q}{k\left|1 + \frac{q}{k}\right|^2} \tag{1.86}$$

$$R = |a|^2 = \left|\frac{1 - \frac{q}{k}}{1 - \frac{q}{k}}\right|^2 \tag{1.87}$$

Il y a maintenant 3 cas différents à considérer :

1. $0 \leq V_0 \leq E - m$: L'énergie cinétique est plus grande que la barrière. Dans ce cas k et q sont réels et on a

$$T = \frac{4qk}{(k+q)^2} \in [0,1], \qquad R = \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 \in [0,1], R + T = 1, \tag{1.88}$$

L'onde incidente est partiellement réfléchie et partiellement transmise, comme en mécanique quantique non relativiste.

2. $E - m \leq V_0 \leq E + m$: Dans ce cas q devient imaginaire et on trouve que

$$T = 0, \quad R = 1, \quad R + T = 1. \tag{1.89}$$

L'onde incidente est totalement réfléchie, ce qui est analogue au cas non relativiste.

3. $E - m \leq V_0$: Dans ce cas q redevient réel mais il faut le choisir négatif pour que $R + T = 1$, avec

$$R = \left(\frac{k + |q|}{k + |q|}\right)^2 > 1, \; T = -\frac{4k\,|q|}{(k - |q|)^2} < 0 \tag{1.90}$$

La probabilité est toujours conservée mais ceci nous coûte un coefficient de transmission négatif et un coefficient de réflexion plus grand que 1. L'interprétation de ce dernier cas est que des paires à énergies positives et négatives sont produites par l'interaction avec le potentiel. On voit que ce phénomène a lieu lorsque la barrière de potentiel est grande, c'est à dire lorsque la localisation de la fonction d'onde est très forte à droite de la barrière. La partie à énergie positive repart vers la gauche et s'additionne à l'onde réfléchie pour donner $R > 1$. La partie à énergie négative remonte vers la droite et donne $T < 0$. On peut expliquer ceci par le fait que la première correspond à une particule de charge q qui subit le potentiel $V(x)$ et contribue de manière positive au courant électrique, tandis que la deuxième correspond à une antiparticule de charge -q. subissant l'opposé du potentiel et contribuant de façon négative au courant électrique. Il faut donc se résoudre au fait que l'interprétation de la fonction d'onde ϕ comme une densité à une particule mène forcément à des complications étant donné que nous sommes confrontés à un problème à plusieurs particules. On pourrait formaliser cette exemple de façon générale en considérant la relation entre les solutions à énergies positives (particules) et négatives (antiparticules) en présence d'un champ externe dans une procédure appelée conjugaison de charge.

1.3 Théorie de Dirac

Equation de Dirac et courant conservé

Soit $\psi(x)$ un vecteur à 4 composantes, que l'on appelle spineur. L'équation de Dirac est donnée par

$$(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m)\,\psi(\mathbf{x}) = 0. \tag{1.91}$$

La quantitéγ^{μ} est un 4−vecteurs de matrices 4×4, agissant sur la fonction d'onde ψ comme sur un vecteur. Ces matrices γ^{μ} restent encore à être trouvées. Afin de déterminer les propriétés que doivent satisfaire les γ^{μ}, on commence par imposer que l'équation de Dirac doit impliquer celle de Klein-Gordon. Pour ce faire, on va appliquer l'opérateur $(-i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m)$ sur l'équation(1.94). On trouve

$$\left(\gamma^{\mu}\gamma^{\gamma}\partial_{\mu}\partial_{\gamma} + m^2\right)\psi(x) = 0 \tag{1.92}$$

En utilisant le fait que les dérivées commutent, on peut réécrire cette équation

$$\left(\frac{1}{2}\{\gamma^{\mu},\gamma^{\gamma}\}\partial_{\mu}\partial_{\gamma} + m^2\right)\psi(x) = 0 \tag{1.93}$$

où$\{.,.\}$ signifie l'anti commutateur. En comparant à l'équation de Klein-Gordon qui s'écrit $(\eta^{\mu\gamma}\partial_{\mu} + m^2)\,\psi(x) = 0$, on en déduit que les matrices γ^{μ} doivent satisfaire l'algèbre de Clifford :

$$\{\gamma^{\mu}\gamma^{\mu},\gamma^{\gamma}\} = 2\eta^{\mu\gamma}1 \tag{1.94}$$

On a noté 1 la matrice identité 4×4 , que l'on omettra dès lors. On voit donc que $(\gamma^0)^2 = 1$ et que $(\gamma^i)^2 = -1$. On peut choisir les matrices γ^{μ} de telle sorte γ^0 que soit hermitienne et que les γ^i soient anti-hermitiennes, ce qui se résume par

$$\gamma^{\mu+} = \gamma^0\gamma^{\mu}\gamma^0. \tag{1.95}$$

L'algèbre de Clifford n'a pas de solution unique. En effet, on voit facilement que les matrices

$$\gamma^{\sim\mu}\gamma^{\sim\mu} = U\gamma^{\mu}U^{-1}, \tag{1.96}$$

avec$U$ une matrice inversible arbitraire, satisfont aussi l'algèbre de Clifford. Il existe un

théorème d'unicité des représentations de l'algèbre de Clifford qui affirme que toute paire de matrices γ^{μ} et $\gamma^{\sim\mu}$ la satisfaisant est reliée par une conjugaison du type l'équation(1.99). On remarquera de plus que, si la matrice U est unitaire, alors les matrices $\gamma^{\sim\mu}$ ont aussi la propriété que $\gamma^{\sim\mu+} = \gamma^{\sim 0}\gamma^{\sim\mu}\gamma^{\sim 0}$. Comme première vérification que l'équation de Dirac n'est pas absurde, on peut voir qu'elle donne lieu à un Hamiltionien hermitien. En effet, l'équation peut s'écrire

$$i\partial_t \psi(x) = H\psi(x) \tag{1.97}$$

avec

$$H = m\gamma^0 - i\ \gamma^0\gamma^i\ \partial i. \tag{1.98}$$

En utilisant le fait que$\gamma^{0^+} = \gamma^0$ et que $(\gamma^0\gamma^i)^+ = \gamma^0\gamma^i$ on voit facilement que $H = H^+$.

Comme pour l'équation de Klein-Gordon, il existe un courant conservé par les fonction $\psi(x)$ vérifiant l'équation de Dirac. On pose

$$J^{\mu} = \psi^+\gamma^0\gamma^{\mu}\psi \tag{1.99}$$

et on vérifie en effet que $\partial_{\mu}J^{\mu} = 0$ Il s'ensuit que, comme d'habitude, la composante 0 de J^{μ} intégrée sur tout l'espace devient une quantité conservée. La densité$\rho = J^0$ s'écrit

$$\rho = \psi^+\psi. \tag{1.100}$$

On verra que l'interprétation de ρ comme densité de probabilité à une particule mène aux mêmes problèmes que dans le cas du champ de Klein - Gordon. En ce qui concerne le produit scalaire, contrairement au cas de Klein - Gordon, on remarque que celui-ci ne doit pas être modifié pour calculer la densité ρ. Il en découle que le calcul des moyennes d'opérateurs ne comporte aucune subtilité et donc que pour un opérateur A on a

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = \int \psi^+ A\psi d^3x \tag{1.101}$$

On remarquera enfin que n'importe quel changement de base de type l'équation(1.99) laisse la densité de courant inchangée si les fonctions d'ondes sont modifiées en $\widetilde{\psi} = U\psi$ et que la matrice U est unitaire. Ceci montre clairement que toutes les prédictions physiques de la théorie de Dirac dépendent uniquement des propriétés algébriques des matrices γ^{μ}. On

va maintenant faire une construction un peu plus explicite des matrices γ^μ. Il est possible de démontrer qu'il faut que ces matrices soient de dimension paire. Pour $d = 2$, on sait que les matrices de Pauli satisfont l'algèbre de Clifford, $\{\sigma^i, \sigma^j\} = 2\delta^{ij}$ Mais comme il n'existe pas d'autres matrices de dimension 2 qui anti commutent avec les trois matrices σ^i, l'algèbre de Clifford ne peut pas être réalisée en dimension 2. En dimension 4 par contre, il est possible de trouver des représentations de l'algèbre de Clifford. Il existe en effet 5 matrices indépendantes qui anti commutent entre elles. On peut en identifier 4 aux matrices γ^μ et choisir la dernière comme

$$\gamma^5 = -i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \tag{1.102}$$

Des propriétés des matrices γ^μ on en déduit que $\{\gamma^\mu, \gamma^5\} = 0$, $(\gamma^5)^2 = 1$ et $\gamma^{5+} = \gamma^5$.

Il existe deux représentations utiles en physique. La première est appelée représentation standard et elle peut être donnée en bloc 2×2 par

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{1.103}$$

La deuxième est appelée représentation de **Weyl** et est définie par

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \gamma^5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{1.104}$$

La représentation standard est plus utile pour étudier les solutions de l'équation de Dirac ainsi que sa limite non relativiste. La représentation de Weyl permet, quant à elle, d'étudier les propriétés de transformations de l'équation de Dirac. On peut évidemment passer d'une représentation à l'autre en utilisant une conjugaison du type l'équation (1.99).

Antiparticules

Comme nous l'avons déjà fait, on va prendre un exemple concret qui permet de se rendre compte que la théorie contient intrinsèquement plusieurs particules. Soit une particule de masse m et énergie $E = \sqrt{\overrightarrow{p} + m^2}$ incidente sur une marche de potentiel

$$V(x) = V_0\theta(x) = qA_0(x). \tag{1.105}$$

On suppose que le paquet d'ondes incident est composé d'énergies positives uniquement.

La solution au problème prend la forme

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \sum A_\alpha u_\alpha(p)\, e^{ipx} + \sum B_\beta u_{\beta(-p)} e^{-ipx} \quad \text{si } x<0 \qquad k{=}\sqrt{E^2-m^2} \\ &= \sum C_\lambda u_\lambda(q)\, e \quad \text{si } x>0 \qquad q=\sqrt{(E^2-V_0)^2-m^2}\end{aligned} \tag{1.106}$$

Il faut imposer la continuité de la fonction d'onde en $x=0$. La dérivée de la fonction n'entre pas en jeu, étant donné que l'équation de Dirac est du premier degré et que le courant de probabilité ne dépend pas des dérivées de la fonction d'onde. En utilisant la forme explicite des spineursu_α, l'analyse, composante par composante, nous impose de résoudre le système

$$\begin{aligned}A_\alpha + B_\alpha &= \sqrt{\frac{E-V_0+m}{E+m}} C_\alpha \\ A_\alpha - B_\alpha &= \frac{q}{p}\frac{E+m}{E-V_0+m}\sqrt{\frac{E-V_0+m}{E+m}} C\alpha\end{aligned} \tag{1.107}$$

On peut résoudre ce système et les coefficients de transmission et réflexion T et R s'écrivent

$$R = \left|\frac{B_\alpha}{A_\alpha}\right|^2 = \left|\frac{1-r}{1+r}\right|^2 \tag{1.108}$$

$$T = \frac{q}{p}\left|\frac{C_\alpha}{A_\alpha}\right|^2 = \frac{4r}{|1+r|^2} \tag{1.109}$$

avec

$$r = \frac{q}{p}\frac{E+m}{E-V_0+m} = \sqrt{\frac{E+m}{E-V_0+m}}\sqrt{\frac{E-V_0-m}{E-m}} \tag{1.110}$$

Il y a alors 3 cas à examiner :

1. $0 \le V_0 \le E-m$: L'énergie cinétique est plus grande que la barrière. Dans ce cas q est réel et positif et on a $r=|r|$.

$$T = \frac{4|r|}{(1+|r|)^2} \in [0,1], \quad R = \left(\frac{1-|r|}{1+|r|}\right)^2 \in [0,1] \qquad R+T=1. \tag{1.111}$$

L'onde incidente est partiellement réfléchie et partiellement transmise , comme en mécanique quantique non relativiste.

2. $E-m \le V_0 \le E+m$: Dans ce cas, q devient imaginaire et on a $r=i|r|$. De plus,

$$T=0, \qquad R=1, \qquad R+T=1. \tag{1.112}$$

L'onde incidente est totalement réfléchie, ce qui est analogue au cas non relativiste.

3. $E - m \leq V_0 \leq E + m$: Dans ce cas, q redevient réel, mais il faut le choisir négatif pour que $R + T = 1$, et alors $r = |r| .Et$,

$$R = \left(\frac{1 + |r|}{1 - |r|}\right)^2 > 1, \quad T = -\frac{4\,|r|}{(1 - |r|)^2} < 0. \tag{1.113}$$

La probabilité est toujours conservée, mais ceci nous coûte un coefficient de transmission négatif et un coefficient de réflexion plus grand que 1.

Exactement comme dans le cas de Klein - Gordon, l'interprétation de ces résultats est que des paires de solutions à énergies positives et négatives se déplaçant vers la gauche et vers la droite s'additionnent et se soustraient aux ondes réfléchies par la barrière. On interprète alors la composante à énergies positives comme une particule de charge q, tandis que la composante à énergies négatives est interprétée comme une particule de charge $-q$. Cette paire de particule-antiparticule contribue de manière opposée à R et$T$ et ceci explique que l'on trouve $R > 1$ et $T < 0$. Il faut donc se résoudre au fait que l'interprétation de la fonction d'onde ψ comme une densité àune particule mène forcément à des complications, étant donné que nous sommes confrontés à un problème à plusieurs particules. On pourrait aussi formaliser cet exemple de façon générale en considérant la relation entre les solutions à énergies positives (particules) et négatives (antiparticules) en présence de champ externe dans une procédure appelée conjugaison de charge.

Ce chapitre est un premier approche dans l'étude de l'équation de Klein-Gordon et de Dirac. On y traite les implications les plus directes de ces deux équations et on interprète physiquement ce qu'on trouve.

La structure a été pensée de telle sorte qu'on utilise des résultats déjà démontrés connus, ou dont la démonstration a été acceptée précédemment, ce qui évite de devoir jongler entre plusieurs parties. Par contre, les équations de Klein - Gordon et de Dirac sont posées sans aucune argumentation physique. Notons enfin que les étapes de calculs ne sont pas toujours explicitées, mais que les grandes lignes du raisonnement sont toujours mentionnées.

En ce qui concerne les pré requis, on suppose que la mécanique quantique non relativiste de base est connue. Des résultats concernant l'atome d'hydrogène seront utilisés sans démonstration. On utilise également des résultats sur le groupe de Lorentz et la théorie des groupes. Le formulation covariante de la physique doit aussi être connue. Par simplicité et pour éviter la lourdeur des équations, le système d'unité est le système naturel, $i.e$. $\hbar = c = 1$

Chapitre 2

Méthode de Nikiforov-Uvarov

La méthode de Nikiforov-Uvarov 1988 (NU) est basée pour la résolution de l'équations de second ordre de type hypergéométrique au moyen des fonctions spéciales orthogonales pour un potentiel donné, l'équation de Schrödinger comme des équations dans des coordonnées sphériques sont réduites à une équation généralisée de type hypergéométrique avec un appropriée du même rang de la transformation $r \rightarrow s$ et alors elles peuvent être résolues systématiquement pour trouver la solution éxact ou solutions particulières. Dans la suite nous présentons en détails la méthode Nikiforov-Uvarov pour la resolution équation de type hypergéométrique publier dans le livre (fonctions spéciales de la physique mathématique ,traduction française Édition Mir.Moscou.1983)[7].

2.1 L'équation différentielle pour les fonctions spéciales

Dans un grand nombre de problèmes importants de la physique théorique et mathématique, on est conduit à l'équation différentielle

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

dans laquelle $\sigma(z)$ et $\widetilde{\sigma}(z)$ sont des polynômes de degré non supérieur à 2,et $\widetilde{\tau}(z)$ un polynomede degré non supérieur à 1. On rencontre des équations de ce type en résolvant les équations de la place et d'Helmholtz en coordonnées curvilignes par séparation des variables, dans les problémes fondamentaux de la mécanique quantique : mouvement d'une particule dans un champ à symétrie 500 sphérique, oscillateur, de harmonique, recherche des solutions

d'équations 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) apparait également dans bon nombre de problèmes modèles de la physique atomique, moléculaire et nucléaire .

Les équations du type (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 cylindrique ;
- fonctions hupergéométriques.

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 $\sigma(z), \widetilde{\sigma}(z)$ *et* $\widetilde{\tau}(z)$ sont susceptibles de prendre toute valeur réelle ou complexe .

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

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

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

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

dans laquelle

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

est un polynôme de degré non supérieur à 1 .puisque

$$\frac{\varphi'}{\varphi} = \left(\frac{\varphi'}{\varphi}\right)' + \left(\frac{\varphi'}{\varphi}\right)^2 = \left(\frac{\pi}{\sigma}\right)' + \left(\frac{\pi}{\sigma}\right)^2, \tag{2.5}$$

l'équation(2.2) devient

$$y' + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} y' + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} y = 0, \tag{2.6}$$

où

$$\tau(z) = \widetilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \tag{2.7}$$

$$\overline{\sigma}(z) = \widetilde{\sigma}(z) + \pi^2(z) + \pi(z)\left[\tau(\widetilde{z}) - \sigma'(z)\right] + \pi'(z)\,\sigma(z). \tag{2.8}$$

Les fonctions $\tau(z)$, $\overline{\sigma}(z)$, sont deux polynômes de degré non supérieurs à 1 et 2 respectivement. L'équation(2.6) est donc de même type que l'équation(2.1). Nous avons trouvé de cette façons la classe des transformation qui laissent inchangé le type de l'équation : ce sont les transformations 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 polynome 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. Choisissons les coefficients du polynôme $\pi(z)$ de telle façons que le polynôme $\overline{\sigma}(z)$ figurant dans l'équation (2.6), soit un multiple exact de $\sigma(z)$,i.e.

$$\overline{\sigma}(z) = \lambda\sigma(z). \tag{2.9}$$

λ étant 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 λ et deux coefficients du polynôme $\pi(z)$. L'équation (2.6) deviendra donc

$$\sigma(z)\,y'' + \tau(z)\,y' + \lambda y = 0. \tag{2.10}$$

Nous dirons que (2.10) est une équation du type hypergéométrique . Il sera donc tout naturel d'appelés l'équation (2.1) équation généralisée du type hypergéométrique.

pour définir le polynôme $\pi(z)$ et la constante λ, mettons la condition l'équation (2.9) sous la forme : $\pi^2 + \left(\widetilde{\tau} - \sigma'\right)\pi + \widetilde{\sigma} - k\sigma = 0$.

où

$$k = \lambda - \pi'(z). \tag{2.11}$$

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

du second degré :

$$\pi(z) = \frac{\sigma' - \widetilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma' - \widetilde{\tau}}{2}\right)^2 - \widetilde{\sigma} + k\sigma}, \tag{2.12}$$

$\pi(z)$ étant un polynôme, le radicante doit être le carré d'un polynôme. pour qu'il en soit ainsi, il faut que soit nul le discriminant du polynôme 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 de l'équation (2.12), puis $\varphi(z), \tau(z)$ et λ à l'aide des formules des équations (2.3), (2.7) et (2.11). Il est évident qu'il existe plus d'une possibilité de réduire l'équation (2.1) à l'équation du type hypergéométrique de l'équation (2.10), possibilités fouries par le chois de la constante k et celui du signe de $\pi(z)$ dans la formule de l'équation(2.12).

Grace à la transformation proposée, on aura à discuter. au lieu de l'équation (2.1), une équation plus simple du type (9) .

Exemple. Mettons sous la forme l'équation (2.10) l'équation de Bessel

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

en faisant le changement $u = \varphi(z) y$. L'équation de Bessel est un cas particulier de l'équation (2.1) pour $\sigma(z) = z$, $\widetilde{\tau}(z) = 1$, $\widetilde{\sigma} = z^2 - \nu^2$. Annulant le discriminant de ce trinôme du second degré, on obtient l'équation pour la constante k : $k^2 + 4\nu^2 = 0$,

d'ou $k = \pm 2i\nu$.l'on a donc, en vertu de l'équation(2.12),

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

Ainsi donc , dans le cas considéré le polynôme $\pi(z)$ peut se mettre sous quatre formes différentes. Plaçons-nous dans le cas où $k = 2i\nu, \pi(z) = iz + \nu$ par exemple. Les formules des équations (2.3), (2.7) et (2.11) nous donnent

$$\varphi(z) = z^{\nu} e^{iz}, \tag{2.13}$$

$$\tau(z) = 2iz + 2\upsilon + 1, \tag{2.14}$$

$$\lambda = k + \pi'(z) = i\ (2\upsilon + 1). \tag{2.15}$$

L'équation(2.10) devient finalement

$$zy'' + (2iz + 2\upsilon + 1)\, y' + i\ (2\upsilon + 1)\, y = 0 \tag{2.16}$$

Remarque.1. Puisque l'équation(2.1) ne change pas lorsqu'on multiplie $\sigma(z)$ et $\widetilde{\tau}(z)$ par c et $\widetilde{\sigma}(z)$ par c^2 (c étant une constante quelconque) on peut admettre que le coefficient affectant le terme de plus haut degré du polynôme $\sigma(z)$ est égal à un nombre donné. Cette remarque reste aussi vraie pour l'équation (2.10).

2.dans la suite, on peut se borner à considérer les cas où, dans les équations (2.1), (2.10), le polynôme $\sigma(z)$ n'admet pas de racine multiples. 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

$$\frac{d^{\,2}u}{ds^2} + \frac{2 - s\widetilde{\tau}(a + 1/s)}{s}\frac{du}{ds} + \frac{s^2\widetilde{\sigma}(a + 1/s)}{s^2}u = 0. \tag{2.17}$$

Les expressions $s\widetilde{\tau}(a + 1/s)$ et $s^2\widetilde{\sigma}(a + 1/s)$ sont deux polynômes de degré non supérieur à 1 et à 2 respectivement en s. Aussi l'équation (2.17) est-elle une équation du type l'équation (2.1) dont le polynôme $\sigma(z)$ est égal à s et n'admet donc pas de racines multiples.

3.Il n'est pas possible de réduire l'équation (2.1) à une équation du type l'équation (2.10) par le procédé décrit si $\sigma(z) = 1$ et si l'expression $(\widetilde{\tau}/2)^2 - \widetilde{\sigma}$ est un polynôme de premier degré . Dans ce cas , pour réduire l'équation(2.1) à une forme plus simple , on peut choisir le polynôme $\pi(z)$ dans l'équation(2.3) de la condition $\tau(z) = 0$. Alors $\overline{\sigma}(z)$ devient un polynôme du premier degré, et l'équation (2.6) s'écrit

$$y'' + (az + b)\, y = 0. \tag{2.18}$$

Par un changement linéaire $s = az + b$, on ramène l'équation(2.18) à un cas particulier de l'équation

$$\frac{d^{\,2}y}{ds^2} + \frac{1 - 2\alpha}{s}\frac{dy}{ds} + \left[(\beta\gamma s^{\nu})^2 + \frac{\alpha^2 - \nu^2\gamma^2}{s^2}\right] y = 0, \tag{2.19}$$

dans laquelle $\alpha, \beta, \gamma, \nu$ sont des constantes. Les solutions de l'équation(2.19) s'expriment au moyen de fonction cylindriques.

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

$$\begin{aligned} u_1' &= a_{11}(z)\, u_1 + a_{12}(z)\, u_2, \\ u_2' &= a_{21}(z)\, u_1 + a_{22}(z)\, u_2 \end{aligned} \tag{2.20}$$

aux coefficients

$$a_{ik}(z) = \frac{\tau_{ik}(z)}{\sigma(z)}, \tag{2.21}$$

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 (2.20), on obtient l'équation définissant $u_1(z)$:

$$u_1'' - \left(a_{11} + a_{22} + \frac{a_{12}'}{a_{12}}\right) u_1' + \left(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} + a_{11}\frac{a_{12}'}{a_{12}} - a_{11}'\right) u_1 = 0 \tag{2.22}$$

Puisque

$$\frac{a_{12}'}{a_{12}} = -\frac{\sigma'}{\sigma} + \frac{\tau_{12}'}{\tau_{12}}, \tag{2.23}$$

l'équation(2.22) sera une équation du type hypergéométrique pour $\tau_{12}' = 0$. Si $\tau_{12}' \neq 0$, on peut effectuer une transformation linéaire

$$\begin{aligned} \upsilon_1 &= \alpha u_1 + \beta u_2, \\ \upsilon_2 &= \gamma u_1 + \delta u_2, \end{aligned} \tag{2.24}$$

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

$$\begin{aligned} \upsilon_1' &= \widetilde{a}_{11}(z)\, \upsilon_1 + \widetilde{a}_{12}(z)\, \upsilon_2, \\ \upsilon_2' &= \widetilde{a}_{21}(z)\, \upsilon_1 + \widetilde{a}_{22}(z)\, \upsilon_2 \end{aligned} \tag{2.25}$$

où les fonctions $\widetilde{a}_{ik}(z)$ sont des combinaisons linéaire des fonctions $a_{ik}(z)$ à coefficients

constants dépendant de $\alpha, \beta, \gamma, \delta$;elles s'écrivent donc

$$\widetilde{a}_{ik}(z) = \frac{\widetilde{\tau}_{ik}(z)}{\sigma(z)}, \tag{2.26}$$

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

En choisissant les coefficients $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ de façon à avoir $\widetilde{\tau}'_{ik} = 0$ (ce que est toujours possible), on obtient , après avoir éliminé la fonction $\upsilon_2(z)$ entre les équations(2.25), une équation généralisée du type hypergéométrique pour la fonction $\upsilon_1(z)$.

Au cas où $\sigma(z)$ est un polynôme de premier degré, on peut passer de l'équation (2.20) à l'équation généralisée du type hypergéométrique par un procédé différent , on choisissant les constantes $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ de telle façon que le coefficient $\widetilde{a}_{12}$ soit indépendant de z , i.e. $\widetilde{\tau}_{12} = \upsilon\sigma(z)$ (υ étant une constante).

2.2 Résolution de l'équation de Schrödinger pour le champ coulombien.

Le seul atome pour lequel l'équation de Schrödinger admette une solution exacte est l'atome d'hydrogène. Or, cela ne diminue nullement l'intérêt de cette solution exacte, car les solutions analytiques dégagées sous formes explicite s'évèrent souvent utiles comme point de départ les calcules approchés relatifs à des systèmes de mècanique quantique plus compliqués.

Si l'on veut donner une description de l'atome d'hydrogène en termes de mécanique quantique, on doit prendre en considération le mouvement relatif de l'électron (masse m , charge $-e$) et du noyau (masse M , charge e).

Nous nous appliquerons cependant à résoudre un problème plus générale, en admettant que la charge du noyau est égale à Z_e . Ce problème présente un intérêt physique immédiat. car les valeurs propres de l'énergie calculées dans ce cas correspondent, à des effets relativistes près, aux niveaux d'énergie observés de l'hatome d'hydrogène ($Z = 1$), de l'atome d'hélium simplement ionisé ($Z = 2$), etc. Un modèle d'atome hydrogénoïde s'avère en outre utile par exemple pour l'étude des spectres des éléments alcalins, ainsi que des spectres des rayons X des atomes à Z élevé.

la condition de normalisation

$$\int_0^\infty R^2(r)\,dr = 1. \tag{2.27}$$

Le problème du mouvement de l'électron se réduit facilement à celui du mouvement d'un corps unique : une particule de masse réduit *)

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \approx m \tag{2.28}$$

mobile dans un champ coulombien $U\ (r) = -Ze^2/r$, i.e. à l'équation de Schrödinger

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)\psi = 0. \tag{2.29}$$

Puisque l'énergie potentielle $U\ (r)$ est négative et s'annule à l'infini, il ressort des considérations physiques que les états du spectre discret n'auront lieu que pour $E \prec 0$.

Passant aux coordonnées sphériques, nous obtenons l'équation pour la fonction $R(r)$:

$$R'' + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right) - \frac{l\ (l+1)}{r^2}\right]R = 0 \tag{2.30}$$

Il est bon de passer dans l'équation (2.30) aux variables sans dimension : à cet effet ,on utilise le système d'unités atomique dans lequel les unités de charge, de longueur et d'énergie sont respectivement la charge de l'électrons e $(e \succ 0)$ et les quantités

$$a_0 = \hbar^2/\left(\mu e^2\right)\ ,\ E_0 = e^2/a_0. \tag{2.31}$$

L'équation (2.30) devient alors

$$R'' + \left[\ 2\left(E + \frac{Z}{r}\right) - \frac{l\ (l+1)}{r^2}\right]R = 0 \tag{2.32}$$

Puisque la fonction d'onde $\psi(r)$ doit être bornée et de carré intégrable, la fonction $\frac{1}{r}R(r)$ sera bornée pour $r \to 0$ et soumise à condition de normalisation(2.27).

L'équation (2.32) est une équation généralisée du type hypergéométrique avec

$$\sigma(r) = r\ ,\ \widetilde{\tau}(r) = 0\ ,\ \widetilde{\sigma}(r) = 2Er^2 + 2Zr - l\ (l+1). \tag{2.33}$$

En effet, on a en l'occurrence $\widetilde{\rho}(r) = 1/r$. Aussi la fonction $\sqrt{\widetilde{\rho}(r)}R(r)$ sera telle de carré intégrable sur l'intervalle $]0, \infty[$ et bornée pour $r \to 0$, car on a la condition de normalisation et la fonction $1/r\ R(r)$ est bornée pour $r \to 0$.

Nous sommes donc en doit d'appliquer la méthode considérée plus haut. Réduisons l'équation(2.32) à l'équation du type hypergéométrique

$$\sigma(r)\, y'' + \tau(r)\, y' + \lambda y = 0 \tag{2.34}$$

en posant $R(r) = \varphi(r)\, y(r)$, où $\varphi(r)$ est solution de l'équation

$$\varphi'/\varphi = \pi(r)/\sigma(r). \tag{2.35}$$

Le polynôme $\pi(r)$ s'écrira alors comme suit :

$$\pi(r) = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - 2Er^2 - 2Zr + l\ \ (l+1) + kr.} \tag{2.36}$$

La constante k sera choisie à partir de la condition que l'expression sous le radical admette des racines multiples. Le polynôme $\pi(r)$ prendra alors l'une des formes possibles suivantes :

$$\pi(r) = \frac{1}{2} \pm \left\{ \begin{array}{ll} \sqrt{-2E}r + l + \frac{1}{2} & \text{pour } k = 2Z + (2l+1)\sqrt{-2E}, \\ \sqrt{-2E}r - l - \frac{1}{2} & \text{pour } k = 2Z - (2l+1)\sqrt{-2E}. \end{array} \right\} \tag{2.37}$$

Il convient d'en choisir celle qui assure à la fonction $\tau(r) = \widetilde{\tau}(r) + 2\pi(r)$ d'avoir une dérivée négative et la racine sur l'intervalle $]0, +\infty[$. Ces conditions sont vérifiées donc par la fonction

$$\tau(r) = 2\left(l + 1 - \sqrt{-2E}r\right). \tag{2.38}$$

ce qui nous donne

$$\pi(r) = l + 1 - \sqrt{-2E}r\ , \qquad \varphi(r) = r^{l+1}e^{-\sqrt{-2E}r}, \tag{2.39}$$

$$\lambda = 2\left[Z - (l+1)\sqrt{-2E}\right], \qquad \rho(r) = r^{2l+1}e^{-2\sqrt{-2E}r}. \tag{2.40}$$

Les valeurs propres de l'énergie E se cherchent à partir de l'équation

$$\lambda + n\ \tau' + \frac{n\ (n-1)}{2}\sigma'' = 0 \quad (n = 0, 1, ...), \tag{2.41}$$

qui donne

$$E_s = -\frac{Z^2}{2\,(n+l+1)^2} \tag{2.42}$$

La valeur de l'énergie E se définit complètement par le nombre $n+l+1$, appelé nombre quantique principal.

Les fonctions propres $y\,(r) = y_{nl}\ (r)$ s'écrivent alors sous la forme

$$y_{nl}\,(r) = \frac{B_{nl}}{r^{2l+1}\exp\left(-\frac{2Zr}{n+l+1}\right)}\frac{d^n}{dr^n}\left[r^{n+2l+1}\exp\left(-\frac{2Zr}{n+l+1}\right)\right] \tag{2.43}$$

et se confondent à un facteur près avec les polynômes de **Laguerre** $L_n^{2l+1}\,(x)$, où $x = \frac{2Zr}{n+l+1}$ *).

La fonction radiale $R\,(r) = R_{nl}\,(r)$ s'écrira définitivement sous la forme

$$R_{nl}\,(r) = C_{nl}e^{-x/2}x^{l+1}L_n^{2l+1}\,(x)\,. \tag{2.44}$$

On s'assure aisément que les fonctions $R_{nl}\,(r)$ satisfont à la condition $\int_0^\infty R_{nl}^2\,(r)\,dr \prec \infty$ que nous avons imposée dès le début.

La constante C_{nl} se cherche de la condition de normalisation :

$$\int_0^\infty R_{nl}^2\,(r)\,dr = 1, \tag{2.45}$$

où

$$\frac{n+l+1}{2Z}C_{nl}^2\int_0^\infty e^{-x}x^{2l+2}\left[L_n^{2l+1}\,(x)\right]^2 dx = 1. \tag{2.46}$$

pour calculer l'intégrale figurant dans l'équation(2.27), on peut utiliser la relation de récurrence pour les polynômes de Laguerre. On a

$$xL_n^{2l+1} = 2\,(n+l+1)\,L_n^{2l+1} - (n+1)\,L_{n+1}^{2l+1} - (n+2l+1)\,L_{n-1}^{2l+1}. \tag{2.47}$$

En vertu de la propriété d'orthogonalité des polynômes de Laguerre, on en déduit aussitôt

$$\begin{aligned}\int_0^\infty e^{-x}x^{2l+2}\left[L_n^{2l+1}(x)\right]^2 dx &= \int_0^\infty e^{-x}x^{2l+1}L_n^{2l+1}(x)\left[2(n+l+1)L_n^{2l+1}(x)+....\right]dx \quad (2.48)\\ &= 2(n+l+1)\int_0^\infty e^{-x}x^{2l+1}\left[L_n^{2l+1}(x)\right]^2 dx = 2(n+l+1)d_n^2,\end{aligned}$$

où d_n^2 est le carré de la norme du polynôme $L_n^{2l+1}(x)$. On a donc

$$C_{nl}^2 = \frac{Z}{(n+2l+1)^2 d_n^2} = \frac{Z_n!}{(n+2l+1)^2(n+2l+1)!}. \quad (2.49)$$

La fonction radiale la plus simple correspond au cas où $n=0$:

$$R_{0l}(r) = \frac{1}{l+1}\sqrt{\frac{Z}{(2l+1)!}}e^{-x/2}x^{l+1}. \quad (2.50)$$

Pour $l=0$ La fonction radiale est la plus compliquée : elle admet autant de zéros que la permet l'énergie donnée . Or, dans ce cas là la fonction d'onde dépend des angles θ,φ de la façon la plus simple :

pour $l=0$ elle présente la symétrie sphérique, car

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \quad (2.51)$$

Exemple 1. Connaissant les fonction radiales $R_{nl}(r)$, on peut calculer les différentes caractéristiques de l'atome hydrogénoïde, telles l'énergie potentielle moyenne $\overline{U}_{nl}$ de l'interaction électrostatique entre l'électron et le noyau , ou la distance moyenne $\overline{r}_{nl}$ entre l'électron et le noyau .

A l'aide de les équations (2.44) et de (2.49), on obtient

$$\begin{aligned}\overline{U}_{nl} &= -\int_0^\infty \frac{Z}{r}R_{nl}^2(r)\,dr = ZC_{nl}^2\int_0^\infty e^{-x}x^{2l+1}\left[L_n^{2l+1}(x)\right]^2 dx = -ZC_{nl}^2 d_n^2 \quad (2.52)\\ &= -\frac{Z}{(n+l+1)^2}.\end{aligned}$$

Ainsi donc , l'énergie globale de l'électron E (voir l'équation(2.42)) est égale à la moitié de l'énergie potentielle moyenne.

Ensuite

$$\overline{r}_{nl} = \int_0^\infty r R_{nl}^2 (r)\, dr = C_{nl}^2 \left(\frac{n+l+1}{2Z} \right)^2 \int_0^\infty e^{-x} x^{2l+1} \left[L_n^{2l+1} (x) \right]^2 dx. \tag{2.53}$$

Pour calculer l'intégrale , il suffit de faire intervenir la relation de récurrence de l'équation (2.47) et de profiter de l'orthogonalité des polynômes de Laguerre :

$$\begin{aligned} \overline{r}_{nl} &= C_{nl}^2 \left(\frac{n+l+1}{2Z} \right)^2 \left[(n+1)^2 d_{n+1}^2 + 4 (n+l+1)^2 d_n^2 + (2l+1)^2 d_{n-1}^2 \right] \qquad (2.54) \\ &= C_{nl}^2 \left(\frac{n+l+1}{2Z} \right)^2 \frac{(2l+1)!}{n!} 2 \left[3 (n+l+1)^2 - l (l+1) \right] = \frac{1}{2Z} \left[3 (n+l+1)^2 - l (l+1) \right]. \end{aligned}$$

Exemple2. Cherchons le potentielle électrostatique créé dans un point donnée de l'espace par un atome hydrogénoïde en utilisant à cette effet des fonction d'onde hydrogénoïdes .

Supposons que l'état stationnaire d'un électron , mobile dans le champ colombien créé par le noyau de charge Ze , soit caractérisé par les nombres quantiques n, l, m . La masse de l'électron étant faible devant celle du noyau , on peut admettre sans grand erreur que le noyau est immobile dans un point $r = 0$. Cherchons le potentiel moyen $V(r)$ créé en r par l'électron et le noyau , nous rappelant que dans les unités adoptées le potentiel du noyau s'écrit Z/r . Il vient

$$V (r) = \frac{Z}{r} - \int \frac{|\psi_{nlm} (r')|^2}{|r - r'|} (r')^2 \, dr' d\Omega'. \tag{2.55}$$

Il est facile de calculer l'intégrale à l'aide de la fonction génératrice pour les polynômes de Legendre et du théorème d'addition pour les fonctions sphérique :

$$\frac{1}{|r - r'|} = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{r_\prec^s}{r_\succ^{s+1}} \left[\frac{4\pi}{2s+1} \sum_{m'=-s}^{s} Y_{sm'}^* (\theta', \varphi') \, Y_{sm'} (\theta, \varphi) \right]. \tag{2.56}$$

Puisque

$$\psi_{nlm} (r') = \frac{1}{r'} R_{nl} (r') \, Y_{lm} (\theta', \varphi'), \tag{2.57}$$

il vient

$$\begin{aligned} \int \frac{|\psi_{nlm} (r')|^2}{|r - r'|} (r')^2 \, dr' d\Omega' &= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2s+1} \sum_{m'} Y_{sm'} (\theta,\ \varphi) \int \frac{r_<^s}{r_>^{s+1}} R_{nl}^2 (r') \, dr' \times \qquad (2.58) \\ &\quad \times \int Y_{lm} (\theta',\ \varphi') \, Y_{lm}^* (\theta',\ \varphi') \, Y_{sm'}^* (\theta',\ \varphi') \, d\Omega'. \end{aligned}$$

Intégrons suivant φ' en utilisant la forme explicite des fonctions sphérique ; il ne reste, dans la somme en m', qu'un seul terme, celui correspondant à $m' = 0$. Il vient définitivement

$$\begin{aligned} V(r) &= \frac{Z}{r} - \sum_{s=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2s+1} Y_{s0}(\theta,\varphi) \int_0^{\infty} \frac{r_{\prec}^s}{r_{\succ}^{s+1}} R_{nl}^2(r')\, dr' \times \\ &\quad \times \int Y_{lm}(\theta',\varphi')\, Y_{lm}^*(\theta',\varphi')\, Y_{sm'}^*(\theta',\varphi')\, d\Omega. \end{aligned} \tag{2.59}$$

l'intégrale $\int_0^{\infty} \frac{r_{\prec}^s}{r_{\succ}^{s+1}} R_{nl}^2(r')\, dr'$ peut s'écrire sous la forme :

$$\int_0^{\infty} \frac{r_{\prec}^s}{r_{\succ}^{s+1}} R_{nl}^2(r')\, dr' = \frac{1}{r^{s+1}} \int_0^r (r')^s R_{nl}^2(r')\, dr' + r^s \int_r^{\infty} \frac{R_{nl}^2(r')}{(r')^{s+1}} dr'. \tag{2.60}$$

l'intégrale du produit de trois fonctions sphériques se réduit à celle du produit de trois fonctions $\Theta_{lm}(\cos\theta)$:

$$\int Y_{lm}(\theta',\varphi')\, Y_{lm}^*(\theta',\varphi')\, Y_{so}^*(\theta',\varphi')\, d\Omega. = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^{1} \Theta_{lm}^2(x)\, \Theta_{so}(x)\, dx. \tag{2.61}$$

La dernière intégrale se laisse exprimer à l'aide des coefficients de Clebsch-Gordon ou des coefficients Wigner qui disponibles sous forme de tables *). Comme les fonctions $\Theta_{lm}(x)$ sont orthogonales, l'intégrale en question n'est nulle que pour $s = 0, 2, ..., 2l, i.e.$la somme en s de(2.58) contient un nombre fini de termes .

Dans le cas où l'électron est à son état fondamental $(n = 0, l = 0)$,toutes les intégrales se calculent sans peine . On obtient en définitive

$$V(r) = \frac{Z-1}{r} + \left(Z + \frac{1}{r}\right) e^{-2Zr}. \tag{2.62}$$

Pour r petits on a , comme il fallait s'y attendre , $V(r) \approx Z/r$, et pour $r \to \infty$ on a $V(r) \approx (Z-1)/r$ (l'électron fait écran au champ du noyau).

2.3 Résolution des équations de Klein-Gordon et de Dirac pour le champ coulombien

Nous venons de considérer l'équation de Schrödinger pour une particule chargée mobile dans le champ coulombien, si l'énergie de la particule diffère sensiblement de son énergie de repos égale à Mc^2(ou M est la masse de la particule et c la vitesse de la lumière), l'équation de Schrödinger devient inopérante : il convient d'utiliser des généralisations relativistes de cette dernière, i .e. soit l'équation de Klein-Gordon, soit l'équation de Dirac, en fonction de la valeur du moment angulaire intrinsèque de la particule (spin).

a) Considérons d'abord l'équation de Klein-Gordon qui définit le mouvement d'une particule chargée de charge $-e$ $(e>0)$,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 de la particule M, la constante de Planck $\hbar$ et la vitesse de la lumière c son égales à 1, l'équation de Klein - Gordon prend la forme

$$\triangle\psi+[(E+\frac{\mu}{r})^2-1]\psi=0 \qquad \left(\mu=\frac{Ze^2}{\hbar c}\approx\frac{Z}{137}\right). \tag{2.63}$$

Pour les états liés on a $0<E<1$.

Nous chercherons des solutions particulières de l'équation (2.63) par séparation des variables en coordonnées sphériques, en posant $\psi(r)=F(r)Y(\theta,\varphi)$ .Procédant dans le même ordre qu'avec l'équation de la place. nous obtiendrons les équation suivantes pour les fonctions $F(r)$ et $Y(\theta,\varphi)$:

$$\triangle_{\theta\varphi}Y+\lambda Y=0, \tag{2.64}$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dF}{dr}\right)+[(E+\frac{\mu}{r})^2-1-\frac{\lambda}{r^2}]F(r)=0. \tag{2.65}$$

On a vu plus haut que l'équation(2.64) n'admet de solutions bornées et univoques pour $0\leq\theta\leq\pi,\ \ 0\leq\varphi\leq2\pi$ que si $\lambda=l(l+1)$,auquel cas $Y(\theta,\varphi)=Y_{lm}(\theta,\varphi)$ est une fonction sphérique .L'équation(2.65) se réduit par le changement $R(r)=rF(r)$ à

$$R''+\left[\left(E+\frac{\mu}{r}\right)^2-1-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0 \tag{2.66}$$

L'équation (2.66) est une équation généralisée du type hypergéométrique avec $\sigma(r) = r$, $\widetilde{\tau}(r) = 0$, $\widetilde{\sigma}(r) = (Er + \mu)^2 - r^2 - l(l+1)$.

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

$$\int_0^\infty R^2(r)\, dr = 1 \tag{2.67}$$

et être horgnée 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 constitue une condition plus restrictive.

L'équation(2.66) admet une singularité pour $r \to 0$. Voyons ce que devient $R(r)$ quand $r \sim 0$. Puisqu'on a pour $r \to 0$

$$\left(E + \frac{\mu}{r}\right)^2 - 1 - \frac{l(l+1)}{r^2} \approx \frac{\mu^2 - l(l+1)}{r^2}, \tag{2.68}$$

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

$$R' + \frac{\mu^2 - l(l+1)}{r^2} R = 0 \tag{2.69}$$

dont les solutions se présentent sous la forme

$$R(r) = C_1 r^{\nu+1} + C_2 r^{-\nu-1}, \tag{2.70}$$

où

$$\upsilon = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 - \mu^2} \tag{2.71}$$

(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. $R(r) \approx C_1 r^{\nu+1}$ pour $r \to 0$.

En effet, nous avons dans le cas considéré $\widetilde{P}(r) = 1/r$, en sorte que la fonction $\sqrt{\widetilde{P}(r)}R(r)$ doit rester bornée pour $r \to 0$ et de carré intégrable 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 (2.67).

Ramenons l'équation(2.66) à l'équation du type hypergéométrique

$$\sigma(r)\, y' + \tau(r)\, y' + \lambda y = 0 \tag{2.72}$$

en posant $R(r) = \varphi(r)\ y(r)$,ou $\varphi(r)$ est solution de l'équation

$$\varphi'/\varphi = \pi(r)/\sigma(r). \tag{2.73}$$

Le polynôme $\pi(r)$ se définira alors par l'expression

$$\pi(r) = 1/2 \pm \sqrt{(l+1/2)^2 - \mu^2 - 2\mu E r + (1-E^2)\, r^2 + kr.} \tag{2.74}$$

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 :

$$\begin{aligned} \pi(r) &= 1/2 \pm \{\sqrt{1-E^2 r} + \nu + \frac{1}{2} \text{ pour } k = 2\mu E + (2\nu+1)\sqrt{1-E^2}. \\ \pi(r) &= 1/2 \pm \{\sqrt{1-E^2 r} - \nu - \frac{1}{2} \text{pour } k = 2\mu E - (2\nu+1)\sqrt{1-E^2}. \end{aligned} \tag{2.75}$$

De toutes les formes possibles de $\pi(r)$,on doit choisir celle pour la quelle la fonction $\tau(r) = \widetilde{\tau}(r) + 2\pi(r)$ a sa racine sur l'itervalle $]0, +\infty[$ et une dérivée négative. Ces conditions seront vérifiées par la fonction $\tau(r) = 2(\nu + 1 - \alpha r), ou\ \alpha = \sqrt{1-E^2},$ ce qui correspond à

$$\begin{aligned} \pi(r) &= \nu + 1 - \alpha r, \quad \varphi(r) = r^{\nu+1} e^{-\alpha r}, \\ \lambda &= 2[\mu E - (\nu+1)\alpha], p(r) = r 2^{\nu+1} e^{-2\alpha r}, \\ (\alpha &= \sqrt{1-E^2}, \quad \nu = -\frac{1}{2} + \sqrt{(\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2)}. \end{aligned} \tag{2.76}$$

Les valeurs propres de l'énergie E se cherchent à partir de l'équation

$$\lambda + n\tau' + \frac{n(n-1)}{2}\sigma' = 0; \tag{2.77}$$

$$E_{KG} = E_n = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\mu}{n+\nu+1}\right)^2}} \qquad (n = 0, 1, ...). \tag{2.78}$$

Les fonctions propres correspondantes $y = y_n(r)$ se présentent alors comme suit :

$$y_n(r) = \frac{B_{nl}}{r^{2\upsilon+1}e^{-2\alpha r}} \frac{d^n}{dr^n}\left(r^{n+2\nu+1}e^{-2\alpha r}\right) \tag{2.79}$$

et se confondent à un facteur prés avec les polynômes de Laguerre $L_n^{2\nu+1}(x), ou\ x = 2\alpha r$. Les fonctions propres $R(r) = R_{nl}(r)$s'écriront

$$R_{nl}(r) = C_{nl}x^{\nu+1}e^{-x/2}L_n^{2\nu+1}(x). \tag{2.80}$$

On vérifie sans peine que les fonctions $R_{nl}(x)$ satisfont à la condition $\int_0^\infty R_{nl}^2(r)\,dr < \infty$ formulée au départ. La constante C_{nl} se trouve de la condition de normalisation de l'équation (2.67), exactement comme dans le cas de l'équation de Schrödinger correspondante.

Examinons le passage à la limite non relativiste dans ce cas la constante μ est petite. Evaluons les autres quantités pour $\mu \to 0$:

$$\nu = l, \quad E \approx 1 - \frac{\mu^2}{2(n+l+1)^2}, \quad \alpha = \sqrt{1-E^2} \approx \frac{\mu}{n+l+1}r. \tag{2.81}$$

$$R_{nl}(r) \approx C_{nl}x^{l+1}e^{-x/2}L_n^{2l+1}(x), \ x = \frac{2\mu}{n+l+1}r. \tag{2.82}$$

en effet, la quantité μr dans notre système d'unités correspond à Zr dans le système atomique, et l'énergie

$$E = 1 - \frac{\mu^2}{2(n+l+1)^2} \tag{2.83}$$

renferme l'énergie de repos de la particule $E_0 = 1$.

b) Considérons maintenant l'équation de Dirac qui définit le mouvement d'une particule chargée de spin demi-entier dans un champ

$$U(r) = -\frac{Ze^i}{r}. \tag{2.84}$$

Dans ce cas la fonction d'onde de la particule admet quatre composantes $\psi_k(r)\ (k = 1, ..., 4)$. Dans un système d'unités ou la masse de la particule$M$, la constante de planck $\hbar$ et la vitesse

de la lumière c sont égales à1 , l'équation de Dirac s'écrira :

$$\begin{aligned} i\left(E+\frac{\mu}{r}+1\right)\psi_1+\frac{\partial\psi_3}{\partial z}+\frac{\partial\psi_4}{\partial x}-i\frac{\partial\psi_4}{\partial y} &= 0, \\ i\left(E+\frac{\mu}{r}+1\right)\psi_2-\frac{\partial\psi_4}{\partial z}+\frac{\partial\psi_3}{\partial x}+i\frac{\partial\psi_3}{\partial y} &= 0, \\ \left(E+\frac{\mu}{r}-1\right)\psi_3+\frac{\partial\psi_1}{\partial z}+\frac{\partial\psi_2}{\partial x}-i\frac{\partial\psi_2}{\partial y} &= 0, \\ \left(E+\frac{\mu}{r}-1\right)\psi_4-\frac{\partial\psi_2}{\partial z}+\frac{\partial\psi_1}{\partial x}+i\frac{\partial\psi_1}{\partial y} &= 0, \end{aligned} \tag{2.85}$$

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

En coordonnées sphériques (r, θ, φ) , les variables dans l'équation(2.85) se séparent si l'on veut chercher la solution sous la forme

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi_1(r) \\ \psi_2(r) \end{pmatrix} &= f(r)\,\Omega_{jlm}(\theta,\varphi), \\ \begin{pmatrix} \psi_3(r) \\ \psi_4(r) \end{pmatrix} &= (-1)^{\frac{l-l'+1}{2}}\, g(r)\,\Omega_{jl'm}(\theta,\varphi), \end{aligned} \tag{2.86}$$

Ici j est 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, $j - 1/2$ et $j + 1/2$, 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 $\Omega_{jl'm}(\theta,\varphi)$ définissent l'influence des variables angulaires sur la fonction d'onde. Ces quantités, appelées spineurs sphériques, sont liées aux fonction sphériques $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \Omega_{jlm} &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+m}{2l+1}}\,Y_{l,m-1/2}(\theta,\varphi) \\ \sqrt{\frac{j-m}{2l+1}}\,Y_{l,m+1/2}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} \quad \text{pour l=j-1/2,} \\ \Omega_{jlm} &= \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j-m+1}{2l+1}}\,Y_{l,m-1/2}(\theta,\varphi) \\ \sqrt{\frac{j+m+1}{2l+1}}\,Y_{l,m+1/2}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} \quad \text{pourl=j+1/2,} \end{aligned} \tag{2.87}$$

pourtant les équations(2.86) dans (2.85), on obtient un système d'équations pour les

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

$$\begin{aligned} f' + \frac{1+x}{r} f - \left(E + 1 + \frac{\mu}{r}\right) g &= 0 \\ g' + \frac{1-x}{r} g + \left(E - 1 + \frac{\mu}{r}\right) f &= 0 \end{aligned} \tag{2.88}$$

où

$$\begin{aligned} x &= -(l+1) \text{ pour } l = j - 1/2, \\ x &= l \text{ pour } l = j + 1/2. \end{aligned} \tag{2.89}$$

Remarquons qu'en approximation non relativiste on a $|f(r)| \gg |g(r)|$ (ce qui sera montré par la suite).

Les conditions définissant les fonctions $f(r)$ et $g(r)$ pour les états du spectre discret se réduisent à ce qui suit : les fonctions $rf(r)$ et $rg(r)$ doivent rester bornées pour $r \to 0$ et vérifier la condition de normalisation

$$\int_0^\infty r^2 \left[f^2(r) + g^2(r)\right] dr = 1. \tag{2.90}$$

Mettons le système d'équations (2.88) sous forme matricielle. Soient

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

On a alors

$$u' = Au, \tag{2.91}$$

où

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

Pour définir $u_1(r)$, éliminons $u_2(r)$, entre les équation(2.91) ; cela nous donnera une équation différentielle du second ordre pour la fonction $u_1(r)$

$$u_1' = \left(a_{11+}a_{22} + \frac{a_{12}'}{a_{12}}\right) u_1' + \left(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} - a_{11}' + \frac{a_{12}'}{a_{12}} a_{11}\right) u_1 = 0. \tag{2.92}$$

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

$$u_2' - \left(a_{11+}a_{22} + \frac{a_{21}'}{a_{21}}\right) u_2' + \left(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} - a_{22}' + \frac{a_{21}'}{a_{21}}a_{22}\right) u_2 = 0. \tag{2.93}$$

Les coefficients de la matrice$A$ s'écrivent

$$a_{ik} = b_{ik} + c_{ik}/r, \tag{2.94}$$

ou b_{ik} et c_{ik} sont des constantes, les équations (2.92)et(2.93) ne sont pas des équations généralisées du type hypergéométrique. Cela tient à ce que

$$\frac{a_{12}'}{a_{12}} = \frac{c_{12}}{c_{12}r + b_{12}r^2}, \tag{2.95}$$

ce qui fait que les coefficients affectant $u_1'(r)$ et $u_1(r)$ dans l'équation (2.92) s'écrivent

$$a_{11} + a_{22} + \frac{a_{12}'}{a_{12}} = \frac{p_1(r)}{r} - \frac{c_{12}}{c_{12}r + b_{12}r^2}, \tag{2.96}$$

$$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} - a_{11}' + \frac{a_{21}'}{a_{21}}a_{11} = \frac{p_2(r)}{r^2} - \frac{c_{12}}{c_{12}r + b_{12}r^2}\frac{c_{11+b_{11}}r}{r} \tag{2.97}$$

($p_1(r)$ et $p_2(r)$ étant des polynômes de degré non supérieur à 1 et à 2 respectivement).

L'équation (2.92) serait une équation généralisée du type hypergéométrique avec $\sigma(r) = r$ si les coefficients b_{12} *ou* c_{12}étaient nuls. Il y a donc intérêt à faire les transformations suivantes. Un changement linéaire

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix},$$

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(2.88). En effet, on obtient au lieu de l'équation(2.91)

$$v' = \widetilde{A}v \tag{2.98}$$

dans laquelle

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

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

donc

$$\widetilde{a}_{ik} = \widetilde{b}_{ik} + \widetilde{c}_{ik}/r, \tag{2.99}$$

ou $\widetilde{b}_{ik}$ et $\widetilde{c}_{ik}$ sont des constantes.

Les équations définissant les fonctions $\upsilon_1(r)$ et $\upsilon_2(r)$ seront analogues à les l'équations (2.92)et(2.93) :

$$\upsilon_1' - \left(\widetilde{a}_{11} + \widetilde{a}_{22} + \frac{\widetilde{a}_{12}}{\widetilde{a}_{12}}\right)\upsilon_1' + \left(\widetilde{a}_{11}\widetilde{a}_{22} - \widetilde{a}_{12}\widetilde{a}_{21} - \widetilde{a}_{11}' + \frac{\widetilde{a}_{12}}{\widetilde{a}_{12}}\widetilde{a}_{11}\right)\upsilon_1 = 0, \tag{2.100}$$

$$\upsilon_2' - \left(\widetilde{a}_{11} + \widetilde{a}_{22} + \frac{\widetilde{a}_{21}}{\widetilde{a}_{21}}\right)\upsilon_2' + \left(\widetilde{a}_{11}\widetilde{a}_{22} - \widetilde{a}_{12}\widetilde{a}_{21} - \widetilde{a}_{22}' + \frac{\widetilde{a}_{21}}{\widetilde{a}_{21}}\widetilde{a}_{22}\right)\upsilon_2 = 0, \tag{2.101}$$

Remarquons que le calcul des coefficients dans les équations (2.100) et(2.101) est facilité par la similitude des matrices A et $\widetilde{A}$:

$$\widetilde{a}_{11} + \widetilde{a}_{22} = a_{11} + a_{22}, \qquad \widetilde{a}_{11}\widetilde{a}_{22} - \widetilde{a}_{12}\widetilde{a}_{21} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}, \tag{2.102}$$

Pour que l'équation (2.100) soit une équation généralisée du type hypergéométrique, il suffit de poser soit $\widetilde{b}_{12} = 0$, soit $\widetilde{c}_{12} = 0$.pour l'équation(2.101), la condition est analogue : soit $\widetilde{b}_{21} = 0$, soit $\widetilde{c}_{21} = 0$,Ces conditions impliquent des restrictions au choix de matrice$C$.

soit

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

Alors

$$C^{-1} = \frac{1}{\triangle}\begin{pmatrix} \delta & -\beta \\ -\gamma & \alpha \end{pmatrix}, \quad \triangle = \alpha\delta - \beta\gamma,$$

$$\widetilde{A} = \frac{1}{\triangle}\begin{pmatrix} (a_{11}\alpha\delta - a_{12}\alpha\gamma + a_{21}\beta\delta - a_{22}\beta\gamma) & a_{12}\alpha^2 - a_{21}\beta^2 + (a_{22} - a_{11})\alpha\beta \\ a_{21}\delta^2 - a_{12}\gamma^2 + (a_{11-}a_{22})\gamma\delta & -a_{11}\beta\gamma + a_{12}\alpha\gamma - a_{21}\beta\delta + a_{22}\alpha\gamma \end{pmatrix},$$

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

$\gg \widetilde{c}_{12} = 0 \gg \quad 2x\alpha\beta + \mu\left(\alpha^2 + \beta^2\right) = 0,$

$\gg \widetilde{b}_{12} = 0 \gg (1+E)\gamma^2 - (1+E)\delta^2 = 0,$

$\gg \widetilde{c}_{21} = 0 \gg \quad 2x\alpha\beta + \mu\left(\alpha^2 + \beta^2\right) = 0,$

Nous voyons que les quantités $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ peuvent être choisies de différentes manières. Les auteurs des manuels de mécanique quantique se bornent généralement à examiner une seule variante définie par $\widetilde{b}_{12} = 0, \widetilde{b}_{21} = 0$. Nous allons considérer, à titre d'exemple, le cas ou les constantes $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ sont choisies en posant $\widetilde{c}_{21} = 0$,et $\widetilde{c}_{21} = 0$,

$\Big($nous verrons par la suite que ces conditions sont préférables à $\widetilde{b}_{12} = 0, \widetilde{b}_{21} = 0\Big)$ .Ces conditions sont vérifiées si la matrice C se présente sous la forme

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

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

$$\upsilon_1^{'} = \left(-\frac{\nu+1}{r} + \frac{E\mu}{\nu}\right)\upsilon_1 + \left(1 + \frac{Ex}{\nu}\right)\upsilon_2, \tag{2.103}$$

$$\upsilon_2^{'} = \left(1 - \frac{Ex}{\nu}\right)\upsilon_1 + \left(\frac{\nu-1}{r} - \frac{E\mu}{\nu}\right)\upsilon_2. \tag{2.104}$$

Si $1 + Ex/\nu \neq 0$, on peut éliminer entre les équations (2.103) et(2.104) la fonction $\upsilon_2(r)$ pour obtenir l'équation différentielle relative à la fonction $\upsilon_1(r)$:

$$\upsilon_1^{'} + \frac{2}{r}\upsilon_1^{'} + \frac{(E^2-1)r^2 + 2E\mu r - \nu(\nu+1)}{r^2}\upsilon_1 = 0 \tag{2.105}$$

Soit maintenant $1 + Ex/\nu = 0, i.e.\ \ E = -\nu/x$,ce qui ne peut avoir lieu qu'avec $x < 0$, car $\nu > 0$ et $E > 0$. La solution de l'équation(2.103) se présente alors sous la forme

$$\upsilon_1(r) = C_1 r^{-\nu-1} e^{\frac{E\mu}{\nu}r}. \tag{2.106}$$

La fonction $\upsilon_1(r)$ ne peut servir de solution qu'avec $C_1 = 0$, auquel cas la fonction $\upsilon_2(r)$ définie par l'équation(2.104) s'écrira

$$\upsilon_2(r) = C_2 r^{\nu-1} e^{-\frac{E\mu}{\nu}r}. \tag{2.107}$$

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

Etudions maintenant la solution de l'équation (2.105). Voyons ce que devient la fonction

$\upsilon_1(r)$ pour $r \to 0$.Puisque

$$\left|\left(E^2-1\right)r^2+2E\mu r\right|\nu(\nu+1) \tag{2.108}$$

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

$$r^2\upsilon_1'+2r\upsilon_1'-\nu(\nu+1)\upsilon_1=0, \tag{2.109}$$

qui a pour solution

$$\upsilon_1(r)=C_1r^{\nu}+C_2r^{-\nu-1}. \tag{2.110}$$

Les conditions imposées à $\upsilon_1(r)$ impliquent $C_2=0$. pour $r\sim 0$. on a donc $\upsilon_1(r)\approx C_1r^{\nu}$.

L'équation (2.105) est une équation généralisée du type hypergéométrique avec $\sigma(r)=r$, $\widetilde{\tau}(r)=2$, $\widetilde{\sigma}(r)=(E^2-1)r^2+2E\mu r-\nu(\nu+1)$.

En effet, on a dans le cas considéré $\widetilde{p}(r)=r$. La fonction $\sqrt{\widetilde{p}(r)}\,\upsilon_1(r)$ doit être de carré intégrable sur l'intervalle $]0,\infty[$ et rester normée pour $r\to 0$, en raison de la condition de normalisation de l'équation(2.90) et du comportement de $\upsilon_1(r)$ pour $r\to 0$.

Réduisons l'équation (2.105) à l'équation du type hypergéométrique

$$\sigma(r)y'+\tau(r)y'+\lambda y=0 \tag{2.111}$$

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

$$\varphi'/\varphi=\pi(r)/p(r) \tag{2.112}$$

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

$$\pi(r)=\nu-ar, \quad \varphi(r)=r^{\nu}e^{-ar}, \tag{2.113}$$

$$\lambda=2[\mu E-(\nu+1)a], \qquad p(r)=r^{2\nu+1}e^{-2ar} \tag{2.114}$$

$$\left(\nu = \sqrt{x^2 - \mu^2}\right). \tag{2.115}$$

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

$$\lambda + n\tau' + \frac{1}{2}n\left(n-1\right)\sigma' = 0 \quad (n = 0, 1, ...), \tag{2.116}$$

d'ou

$$\mu E - \left(n + \nu + 1\right)a = 0 \quad \left(a = \sqrt{1 - E^2}\right). \tag{2.117}$$

et les fonctions propres, de la formule de Rodrigues

$$y_n\left(r\right) = \frac{C_n}{p\left(r\right)}\frac{d^n}{dr^n}[\sigma^n\left(r\right)p\left(r\right)] = C_n r^{-2\nu-1}e^{2ar}\frac{d^n}{dr^n}\left(r^{n+2\nu+1}e^{-2ar}\right). \tag{2.118}$$

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

La valeur propre de l'énergie $E = -\nu/x$ obtenue précédemment vérifie l'équation(2.117) pour $n = -1$.Il est donc naturel de remplacer n par $n - 1$,dans les formules les équations $(2.117), (2.118)$et de propres de l'énergie à partir de l'égalité

$$\mu E - \left(n + \nu\right)a = 0 \qquad (\ n = 0, 1, ...). \tag{2.119}$$

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

$$\begin{aligned} \upsilon_1\left(r\right) &= \{A_n x^\nu e^{-x/2}L_{n-1}^{2\nu+1}\left(x\right) \qquad pour\ n = 1, 2, ..., \\ &= 0 \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad pour\ n = 0. \end{aligned} \tag{2.120}$$

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

De l'équation (2.103) on déduit pour $E = E_n$ $(n = 1, 2, ...)$

$$\upsilon_1\left(r\right) = \frac{1}{1 + \frac{Ex}{\nu}}\left[\upsilon_1'\left(r\right) + \left(\frac{\nu+1}{r} - \frac{E\mu}{\nu}\right)\upsilon_1\left(r\right)\right]. \tag{2.121}$$

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

$$\upsilon_2(r) = x^{-\nu-1}e^{-x/2}y(x), \tag{2.122}$$

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 (2.103)et(2.104) :

$$\acute{\upsilon_1}(r) + \frac{2}{r}\acute{\upsilon_2} + \frac{(E^2-1)r^2 + 2E\mu r + \nu(1-\nu)}{r^2}\upsilon_1 = 0, \tag{2.123}$$

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

$$x\acute{y} + (2\nu - x)\acute{y} + ny = 0. \tag{2.124}$$

L'équation(2.124) est une équation du type hypergéométrique. Sa seule solution polynomiale est le polynôme de laguerre $y(x) = B_n L_n^{2\nu-1}(x)$, d'où

$$\upsilon_2(r) = B_n x^{2\nu-1}e^{-x/2}L_n^{2\nu-1}(x). \tag{2.125}$$

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

pour établir la relation entre les constantes A_n et B_n dans les équations (2.120) et (2.125), confrontons le comportement du premier et du second membres de l'égalité l'équation(2.103) pour$r \to 0$. Utilisant la formule

$$L_n^{\alpha}(0) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!\Gamma(\alpha+1)}, \tag{2.126}$$

on trouve

$$2a\nu A_n L_{n-1}^{2\nu+1}(0) = -2a(\nu+1)A_n L_{n-1}^{2\nu+1}(0) + \left(1 + \frac{Ex}{\nu}\right)B_n L_n^{2\nu-1}(0), \tag{2.127}$$

d'où

$$A_n = \frac{\nu + Ex}{an(n+2\nu)}B_n \qquad (n = 1, 2, ...). \tag{2.128}$$

Puisque

$$n(n+2\nu) = (n+\nu)^2 - \nu^2 = \frac{E^2\mu^2}{a^2} - \nu^2 = \frac{E^2x^2 - \nu^2}{a^2}, \tag{2.129}$$

on a

$$A_n = \frac{a}{Ex-\nu} B_n. \tag{2.130}$$

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

$$\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = C^{-1} \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \end{pmatrix}, \quad C^{-1} = \frac{1}{2\nu(x-\nu)} \begin{pmatrix} \mu & x-\nu \\ x-\nu & \mu \end{pmatrix}. \tag{2.131}$$

Aussi

$$f(r) = \frac{B_n}{2\nu(x-\nu)} x^{\nu-1} e^{-x/2} \left[f_1 x L_{n-1}^{2\nu+1}(x) + f_2 L_n^{2\nu-1}(x) \right]. \tag{2.132}$$

$$g(r) = \frac{B_n}{2\nu(x-\nu)} x^{\nu-1} e^{-x/2} \left[g_1 x L_{n-1}^{2\nu+1}(x) + g_2 L_n^{2\nu-1}(x) \right]. \tag{2.133}$$

où

$$f_1 = \frac{a\mu}{Ex-\nu}, \qquad f_2 = x-\nu, \qquad g_1 = \frac{a(x-\nu)}{Ex-\nu}, \qquad g_2 = \mu; \tag{2.134}$$

$$a = \sqrt{1-E^2}, \;\; E = E_n = \frac{1}{\sqrt{1+\left(\frac{\mu}{n+\nu}\right)^2}}. \tag{2.135}$$

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 B_n à partir de la condition de normalisation l'équation(2.90).On a

$$\int_0^\infty r^2 \left[f^2(r) + g^2(r) \right] dr = \frac{B_n^2}{4\nu^2 (x-\nu)^2 (2a)^3} \int_0^\infty e^{-x} x^{2\nu} \tag{2.136}$$

$$\left\{ \begin{array}{c} \left[f_1 x L_{n-1}^{2\nu+1}(x) + f_2 x L_n^{2\nu-1}(x) \right]^2 + \\ \left[g_1 x L_{n-1}^{2\nu+1}(x) + g_2 x L_n^{2\nu-1}(x) \right]^2 \end{array} \right\} dx = 1.$$

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

$$J_1 = \int_0^\infty e^{-x} x^{\alpha+1} \left[L_n^\alpha(x) \right]^2 dx. \tag{2.137}$$

$$J_2 = \int_0^\infty e^{-x} x^\alpha L_{n-1}^\alpha(x) \, L_n^{\alpha-2}(x) \, dx. \tag{2.138}$$

L'intégrale J_1se laisse exprimer à l'aide du carré de la norme

$$d_n^2 = \int_0^\infty e^{-x} x^\alpha \left[L_n^\alpha(x)\right]^2 dx = \frac{1}{n!}\Gamma(n+\alpha+1). \tag{2.139}$$

en fisant intervenir la relation de récurrence

$$xL_n^\alpha(x) = -(n+1)L_{n+1}^\alpha(x) + (2n+\alpha+1)L_n^\alpha(x) - (n+\alpha)L_{n-1}^\alpha(x) \tag{2.140}$$

et la propriété d'orthogonalité

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha L_n^\alpha(x) L_m^\alpha(x)\, dx = 0 \quad (m \neq n). \tag{2.141}$$

D'ou

$$J_1 = (2n+\alpha+1)\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha \left[L_n^\alpha(x)\right]^2 dx = \frac{1}{n!}(2n+\alpha+1)\Gamma(n+\alpha+1). \tag{2.142}$$

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

$$L_n^{\alpha-2}(x) = c_1 L_n^\alpha(x) + c_2 L_{n-1}^\alpha(x) + ... \tag{2.143}$$

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

$$c_1 = 1, \qquad c_2 = -2. \tag{2.144}$$

Il vient alors

$$J_2 = -\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha \left[L_{n-1}^\alpha(x)\right]^2 dx = -2\frac{\Gamma(n+\alpha)}{(n-1)!}. \tag{2.145}$$

Aussi

$$B_n = 2a^2\sqrt{\frac{(x-\nu)(Ex-\nu)!}{\mu\Gamma(n+2\nu)}}. \tag{2.146}$$

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

Il vient finalement

$$\begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix} = \frac{a^2}{\nu}\sqrt{\frac{(Ex-\nu)\,n!}{\mu(x-\nu)\Gamma(n+2\nu)}} x^{\nu-1} e^{-x/2} \begin{pmatrix} f_1 & f_2 \\ g_1 & g_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} xL_{n-1}^{2\nu+1}(x) \\ xL_n^{2\nu-1}(x) \end{pmatrix}, \tag{2.147}$$

où

$$f_1 = \frac{a\mu}{Ex-\nu}, \qquad f_2 = x-\nu, \qquad g_1 = \frac{a\,(x-\nu)}{Ex-\nu}, \qquad g_2 = \mu \tag{2.148}$$

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 très faible. Evaluons les ordres de pettesse des autre quantités pour $\mu \to 0$.On a

$$E \approx 1 - \mu^2/\left(2N^2\right) \qquad (N = n+\nu), \tag{2.149}$$

$$a = \sqrt{1-E^2} \approx \mu/N, \qquad \nu - |x| \approx -\mu^2/\left(2\,|x|\right). \tag{2.150}$$

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 a alors l'orde $x = -(l+1)$, $x - \nu \approx 2x$,

$Ex - \nu \approx 2x$, don

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

2) soit $l = j - 1/2$. On a alors $x = l$, $x - \nu \approx \frac{1}{2l}\mu^2$, $Ex - \nu \approx (E-1)\,x + (x-\nu) \approx \frac{\mu^2}{2!N^2}\left(N^2 - l^2\right)$, d'ou

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

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

$$f(r) \approx \pm 2\mu^{3/2}\sqrt{\frac{(N-l-1)!}{(N+l)!}}x^l e^{-x/2}L_{N-l-1}^{2l+1}(x). \tag{2.151}$$

Le signe positif correspond à $l = j + 1/2$, et le signe négatif à $l = j - 1/2$.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 fonction $f(r)$, $g(r)$ sous la forme de l'équation (2.147), nous facilitons considérablement le passage à la limite non relativiste, car, pour $\mu \to 0$,l'un des coefficients f_1, f_2, g_1,g_2 brusquement par rapport aux 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 en entre la solution de l'équation de Schrödinger et la limite non relativiste, à faire intervenir accessoirement les relation de récurrence pour les fonctions hypergéométriques.

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

$$L_n^{\alpha}(x) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!(\alpha+1)} F(-n, \alpha+1, x). \tag{2.152}$$

La représentation l'équation (2.147) devient alors

$$\begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix} = D_n x^{\nu-1} e^{-x/2} \begin{pmatrix} \overline{f_1} & \overline{f_2} \\ \overline{g}_1 & \overline{g}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} xF(-n+1, 2\nu+2, x) \\ F(-n, 2\nu, x) \end{pmatrix}, \tag{2.153}$$

où

$$Dn + \frac{1}{\nu\Gamma(2\nu+2)} \sqrt{\frac{(Ex-\nu)\Gamma(n+2\nu)}{\mu(x-\nu)n!}}, \tag{2.154}$$

$$\overline{f_1} = a\mu(Ex+\nu), \qquad \overline{f_2} = 2\nu a^2(2\nu+1)(x-\nu), \tag{2.155}$$

$$\overline{g_1} = a(x-\nu)(Ex+\nu), \quad \overline{g_2} = 2\mu\nu a^2(2\nu+1), \tag{2.156}$$

Les expressions ainsi obtenues de $f(r)$ et de $g(r)$ restent aussi vraies, à un facteur de normalisation prés, pour les valeurs du spetre continu, à condition de prendre, au lieu des n entiers, une constante $n = n(E)$ liée à la valeur donnée de E par la relation de l'équation (2.119),*i.e.*

$$n = \frac{\mu}{i\sqrt{E^2-1}} - \nu, \ E > 1. \tag{2.157}$$

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.

Dans ce chapitre nous avons introduit la méthode NU pour la résolution d'une EDO du second ordre. Cette méthode est très performante et facile à appliquer. Nous avons aussi vu que le cas d'un potentiel coulombien avec une masse constante traitre soit d'une façons non relativiste par celles de Klein-Gordon et de Dirac peut mener à une EDO qui vérifie les

critères de la méthode NU.

Comme autre illustration de l'application de cette méthode NU, nous reprendrons dans le chapitre IV le cas d'un potentiel coulombien décrivant l'interaction d'un électron de charge e^-se déplaçant dans le champ électrostatique du noyau. Mais cette fois-ci la masse de l'électron sera considérée comme dépondant de la position, et l'étude sera faite pour le cas relativiste à travers l'équation de Klein-Gordon.Si le noyau est le noyau se compose uniquement d'un proton de charge positive e^+, le problème étudié est celui de l'atome d'hydrogène qui est un véritable système physique à trois dimensions. Ainsi, l'atome d'hydrogène consiste en un électron se déplaçant dans un puits de potentiel sphérique en raison de l'attraction Coulombienne du proton. Ce système à deux particules (électron - proton) peut être converti en un système avec une particule fictive (de masse réduite) se déplaçant par rapport au barycentre du système électron-proton.

Chapitre 3

Les systèmes à masses dépendant de la position

Beaucoup de travaux ont abordé le sujet de l'hamiltonien généralisé à des systèmes à masses effectives dépendent de la position. De nombreux auteurs ont été attirés par la recherche dans ce domaine aux applications diverses et multiples dans la vie scientifique contemporaine (physique nucléaire, physique des matières condensées, semi conducteurs...). A cause de cette importance, nous allons dans ce chapitre, collecter et résumer les principaux articles des différents auteurs qui étaient à l'avant garde des chercheurs dans ce domaine. Il est remarquable qu'à l'exception des articles que l'on résumera dans ce qui suit et d'autres cités en référence, aucun ouvrage propre à ce domaine n'a été écrit jusqu'à présent. Pour toutes ces raisons, nous avons relevé le défi pour offrir un cadre ou un repère dans lequel nous avons mis en ordre les auteurs et les articles les plus pertinents aux quels une personne trés restrent intéressée par ce domaine ne peut ni les ignorer ni les omettre comme références.

Ce chapitre contient un aspect, une revue historique. Dans cette aspect, nous passons en revue de façon chronologique, les apports les plus importants pour la compréhension des propriétés liées à des systèmes à masses dépendant de la position.

3.1 L'hamiltonien généralisé :

3.1.1 Revue historique :

D. J. Ben Daniel et C. B. Duke (1966)

Dans cet article [8] , 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 de surface 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 $B_{BDD} = P\left[m\left(x\right)\right]^{-1} p/2$;[3].

Thaddeus Gora et Ferd Williams (1968)

Dans cet article[9], 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 hermètique

$H_{GW(B)} = \left(p^2\left[m\left(x\right)\right]^{-1} + \left[m\left(x\right)\right]^{-1} p^2\right)/4$; Les semi-conducteurs qui ont une gradation lente dans leur composition présentent des bandes d'énergie et des masses effectives qui dépendent 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 [3].

Apport de Von Roos (1983)

Dans cet article [10] Le mouvement des porteurs libres (des électrons et des trous) dans les semi-conducteurs de composition chimique non uniforme est parfois décrit au moyen d'un hamiltonien possédant une masse efficace dépendent de la position. Dans des travaux

précédents il a été prouvé que le fait que les masses dépendent de la position mène à des contradictions et ce à cause du théorème de Bargmann, qui postule qu'une superposition logique des états des différentes masses (paquets d'ondes) est interdite. Il propose une extension du théorème de Bargmann mais qui mène à un hamiltonien avec masses dépendent de la position ne vérifiant plus l'invariance galiléenne. Il montre aussi que la dérivation usuelle de l'hamiltonian avec masse efficace dépendant de la position est nullement unique. Il existe en général, beaucoup de hamiltonians inégaux issus de la même approximation, tous dérivés de beaucoup de formes d'hamiltonians de base. Et tant que le concept d'une masse dépendante de la position est maintenu ni l'unicité ni l'invariance galiléenne des hamiltoniens ne sont assurées. Il semble pour l'auteur approprié d'abandonner le concept d'une masse dépendante de la position, dans ses travaux antérieurs, il a montré comment le faire avec succès. L'importance d'une compréhension théorique des phénomènes de transport dans les semi-conducteurs avec une composition chimique variable et dépendante de la position pour des dispositifs technologiques modernes n'a plus besoin d'être soulignée. 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 :

$$T = -\hbar^2/4 \left(m^\alpha \nabla m^\beta \nabla m^\gamma + m^\gamma \nabla m^\beta \nabla m^\alpha \right) \tag{3.1}$$

et

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

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 [4].

I.2. Jean-Marc Lévy-Leblond (1995)

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. Afin

de soutenir sa thèse il propose également un modèle très élémentaire dans le cadre de l'approximation de la fonction d'enveloppe. L'étude d'hétéro structures 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 fonction d'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 hermétique pour le cas d'une masse dépendent 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 :

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

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

c) L'idée de l'utilisation d'une masse dépendant de la position est non seulement intéressante mais elle est aussi consistante [4]

L.dekar et L.Chetouani et T.F.Hammann (1995)

Dans cet article sous le titre :"Fonctions de Green, via le formalisme des intégrales de parcours pour des systèmes à potentiels et à masses constants par morceaux [12], et ont étudié des systèmes à potentiels et à masses constants par morceaux. Ils ont utilisé le formalisme des intégrales de parcours pour relier, la fonction de Green de systèmes à potentiels et à masses constants 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 [3]

L.dekar et L.chetouani et T.F.Hammann (1999)

Dans leurs article sous le titre : "Wave function for smooth potential and mass step"[**?**] il ont proposé la solution de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle, pour l'hamiltonien effective généralisé

$H_{gen} = -1/4(m^{\alpha}Pm^{\beta}Pm^{\gamma} + m^{\gamma}Pm^{\beta}Pm^{\alpha}) + V$, où $\alpha + \beta + \gamma = -1$. 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 $[m(x)^{-1}]d(\psi(x))/dx$ [3]

DutraetAlmeida(2000)

Dans l'article dénommé "Solvabilité exacte des potentiels avec masse effective dépendant de la position "[13], 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. Ce pendant, 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 les conditions de continuité aux frontières de l'hétérojonction obtenue par Zhu et Kroemer sont les plus fiables

[3]

Mustafa et Mazharimousavi(2007)

Ces auteurs [14] ont utilisé la notion d'opérateur pseudo - moment pour aboutir à la conclusion que le " bon ordre fiable " est le choix ($\beta = -1/2, \alpha = \gamma = -1/4$)[3]

3.2 Ordre des opérateurs dans l'hamiltonien avec masse effective dépendant de la position

3.2.1 L'hamiltonien pour une masse effective dépendant de la position

I'Hamiltonien dans ce cas lest écrit sous la forme

$$T = -\left(\hbar^2/2\right) m^{\alpha} \nabla m z^{\beta} \nabla m^{\alpha} + v, \text{où } 2\alpha + \beta = -1$$

H : l'opérateur de l'énergie cinétique

est appliqué au problème d'hétéro structures périodiques avec des interfaces abruptes et une distribution de masse discontinue. Afin de déterminer l'opérateur le plus approprié, les résultats numériques de l'énergie de la transition des inter-bandes et d'inter-sous-bandes sont comparés aux données expérimentales pour différents super-réseaux $GaAs/AlxGa1 - xAs$ et puits quantiques. L'ordre en relation avec le décalage d'énergie comme une fonction des paramètres structuraux (épaisseur du puits, épaisseur et hauteur de la barrière) y a été étudiée. Il a constaté que la variation de l'opérateur d'énergie cinétique peut causer un excès de décalage d'énergie de transition de l'ordre de $40MeV$, le modèle avec $\alpha = 0$ et $\beta = -1$ produit le meilleur accord avec les résultats expérimentaux. La théorie de la masse efficace ($Effective\ MasseTheory \equiv EMT$) est un outil important et utilisé largement dans la physique des semi-conducteurs. A l'origine, elle a été développée pour l'analyse des cristaux homogènes, cette théorie appliquée aux hétéro structures avec masse efficace dépendante de la position, devient asymptotiquement exacte quand les perturbations des états de l'électron et du trou sont suffisamment lisses. Toute l'approche devra être modifiée afin de tenir compte du cas de structures avec des hétéro interfaces abruptes. malgré cela, (EMT) continue d'être extensivement utilisée comme un outil important pour calculer et déterminer l'électrodynamique, l'électrostatique, l'électronique ainsi que les propriétés optiques de beaucoup d'hétéro structures à interfaces abruptes, y sont inclus des super réseaux et des puits quantiques. Il a été reconnu depuis longtemps, que l'application $d'EMT$ aux interfaces abruptes souffre du problème d'ambiguïté dans l'opérateur d'énergie cinétique ($KineticEnergyOperator \equiv KEO$), les opérateurs moment $-i\hbar\nabla$ et masse efficace dépendant de la position $m(z)$ ne commutent plus, ceci mène à la non unicité de (KEO),

qui peut être écrite dans sa forme générale comme

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

Avec

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

Pour des interfaces abruptes α doit être égale à γ, autrement la fonction d'onde s'annule à l'hétéro interface, ce qui aurait été clairement un résultat non physique. En outre, sauf si $\alpha = \gamma$, l'énergie de l'état fondamental diverge dans la limite des interfaces abruptes. Ceci réduit l'équation(1) à :

$$T = -\left(\hbar^2/2\right) m^{\alpha} \nabla m^{\beta} \nabla m^{\alpha} \text{ avec } \alpha + \beta = -1$$

Les valeurs possibles du paramètre β varie de -1 à 0. Les conditions de raccordement pour la fonction d'onde enveloppe $\psi(z)$ et sa dérivée $d\psi(z)/dz$ sont la continuité aux interfaces de :

$$\left[m^{\alpha}\right] \psi\left(z\right) \text{ et } \left[m^{\beta}\right] d\left(\left[m^{\alpha}\right] \psi\left(z\right)\right)/dz \tag{3.2}$$

Un effort considérable a été dépensé afin d'établir une valeur préférée de β, avec l'espérance que cette valeur devrait être universelle et ne devrait pas dépendre des matériaux particuliers formant les interfaces abruptes. Divers auteurs sont arrivés, cependant, à des conclusions diamétralement opposées, soit $\beta = 0$ ou $\beta = -1$ jugés pour être des choix les plus plausibles. Il convient de noter que la condition de la continuité de la probabilité du courant à travers une interface abrupte ne peut pas être employée comme critère pour choisir la valeur de β, car elle mène à une condition de continuité qui est indépendante de l'ordre choisi. Les conclusions pour $\beta = 0$ ont été tirées en reformulant le problème de règle de raccordement en extrapolant d'abord la fonction enveloppe de chaque côté d'un hétéro interface comme si le semi-conducteur était homogène, et en comparant les résultats du calcul du modèle de Kronig - Penney de la transmission d'électron par un ensemble de centres diffuseurs à potentiels sous formes de fonctions δ de Dirac avec le coefficient de transmission obtenue en utilisant $l\prime EMT$. La conclusion opposée, avec $\beta = -1$ a été atteinte en employant la représentation de Kohn - Luttinger et la transformation canonique, en étudiant des conditions appropriées pour la fonction d'onde à travers une hétérojonction abrupte à trois dimensions, en considérant des

limites inhérentes pour l'uniformité dans un puits de potentiel sous forme d'une fonction δ de Dirac extrêmement étroit, en comparant les calculs exacts de la structure de la bande microscopique avec celles qui résultent de *l'EMT* pour les super-réseaux à puits quantique et potentiels localisés, par l'application de l'invariance galiléenne instantanée, et en considérant le passage à la limite abrupte du potentiel et de la masse continûment variables. Il a abouti à la conclusion que le paramètre β doit être égal à -1, ce qui correspond à l'hamiltonien proposé par Ben Daniel, et l'ordre obtenu pour les semi-conducteurs d'une non homogénéité à variation lente en utilisant un ensemble de base qui diagonalise exactement l'hamiltonien dans la limite homogène. D'autres valeurs intermédiaires de β ont été également suggérées. Par exemple, la considération de la limite non relativiste de l'hamiltonien de Dirac avec une masse dépendant de la position, prise par l'intermédiaire de l'approximation de Foldy-Wouthuysen mène à l'adoption de $\alpha = 0$, $\beta = -\frac{1}{2}$ et $\gamma = -\frac{1}{2}$ ce qui est en violation de la règle de Morrow et Brownstein $\alpha = \gamma$, Cavalant et al ont constaté que pour les hétérojonctions $GaAs/Al0-3Ga0-7As$, il n'y a pratiquement aucune différence entre les divers modèles de KEO, il concluent que les résultats actuels suggèrent qu'aucune expérience ne peut être exécutée de nos jours sur des échantillons de semi-conducteur pour déterminer la forme de KEO pour des systèmes avec la masse efficace spatialement variable puisque les largeurs réelles d'interface excluent cette possibilité.

Cavalant et al notent que la transmission est sensible à KEO seulement quand on considère une interface abrupte, cependant, ils pensent qu'il est essentiel d'inclure la discontinuité de la distribution de la masse efficace en traitant une interface abrupte (à moins que l'hétéro structure soit sévèrement dégradée) : $m(z) = m_1 + \triangle m_{12}\ominus(z)$, où $\ominus(z)$ est la fonction marche de Heaviside, m1 la masse efficace dans un des deux matériaux, et $\triangle m_{12}$ la différence des masses efficaces pour ces matériaux. Dans le cadre *d'EMT* il est prouvé que différentes hypothèses initiales peuvent mener à différentes lois de KEO, il est incertain si une solution générale existe, néanmoins, il est toujours possible de comparer les prévisions théoriques pour β avec les résultats expérimentaux afin de déterminer la forme correcte de KEO. Galbraith et Duggan ont comparé les calculs optiques de l'énergie de la transition à basse température de spectres d'excitation de photoluminescence de puits quantiques $GaAs/Al0.35Ga0.65As$. Leurs résultats pour deux échantillons (épaisseur de puits 5 et $7nm$) ont montré que $\beta = -1 \pm 0.1$ et $\beta = -1.1 \pm 0.5$ malheureusement, leur ensemble de paramètres n'a pas été complètement édité ainsi ils ne pourraient pas répéter leurs

résultats. Dans un autre travail, Fu et $Chao$ ont signalé que les observations expérimentales de l'énergie de transition d'inter bande n'étaient pas sensibles au choix de β. Dans cet article, ils démontrent que, contrairement à l'affirmation de Fu et de$Chao$, les énergies de transition d'inter bande changent sensiblement avec β. en outre, ils montrent cela dans le cadre d'EMT pour les interfaces abruptes et une distribution de masse discontinue, les énergies de transition d' inter-sous-bandes peuvent également changer sensiblement avec β, La comparaison avec des données disponibles confirme que le choix de $\beta = -1$ fournit le meilleur accord avec résultats expérimentaux [4]

Nous avons traité dans ce chapitre des systèmes quantiques avec une masse qui dépend de la position (MDP), donc nous avons traité l'Hamiltonien effectif généralisé et nous avons vérifié l'étude de Jean-Marc Levy-Leblond. Nous donnons un rappel historique sur les travaux les plus importants réalisés par les auteurs dans ce domaine, ainsi que les valeurs proposées pour les paramètres d'ambiguïté (α, β, γ),

Chapitre 4

La résolution de l'équation de Klein - Gordon pour différents potentiels et différentes masses

Dans des dernières années, le formalisme construit pour la variation de la masse dépend de la position a reçu beaucoup d'attentions a cause de trouver de nombreuses applications dans différents domaines. Le formalisme de masse dépendant de la position a été utilisé pour décrire les propriétés électroniques des semi - conducteurs et des points quantique, il aussi donne également des résultats intéressants dans l'étude de (^{3}**He**) et liquides quantiques. Le formalisme de masse dépendant de la position pose des problèmes fondamentaux des l'études des systèmes physiques, tel que les discontinuités possibles des fonctions des masse choisies, l'invariance de la théorie sous la transformation de Galiliée, l'ambigüité de l'ordre entre impulsion, et les opérateurs de masse dans le terme d'énergie cinétique.

Récemment, les solutions de l'équation d'onde non-relativiste avec une masse ont été généralisiée au cas masse dépendant de la position.

L'équation de Schrödinger avec une masse dépendant de la position est étudiée en utilisant l'algèbre paramétrique, et dans les espaces courbes a été étudié dans l'exemple de potentiel coulombien, la technique d'invariance de forme a été appliquée aux hamiltoniens solvables. Bagchi et *AL*, ont généré un formalisme pour obtenir des hamiltoniens PT-symétriques dans le cas PDM. En a été fait une généralisation de la transformation canonique de point résoudre l'équation de Schrödinger en d-dimension. Les auteurs ont également étudié la-pseudo-hermicité des hamiltoniens non-hermitiens avec masse dépendant de la position. le

investigation d'un hamiltonien non-hermitien pour un oscillateur défini par le modèle de Swanson a été réalisée dans le cadre de la super symétrie N-fold. Un autre domaine a reçu beaucoup d'attentions est l'extension des solutions non-relativistes aux solutions relativistes du point de vue du formalisme de masse dépendant de la position. Les spectres d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes des équations de Klein-Gordon et Dirac ont été trouvé pour différents potentiels en utilisant des méthodes différentes, telles que Lorentz complexifiée interactions scalaires, potentiel de Coulomb, potentiels hyperboliques, non hermétiques potentiels complexifiés, potentiel trigonométrique PT-symétrique, PT-symétrique oscillateur harmonique, PT-symétrique inversement linéaire plus linéaire, et PT- symétrique potentiels, potentiel inversement linéaire plus linéaire, et potentiel Scarf II.

Dans cette étude, nous résolvons l'équation radiale de Klein - Gordon pour le potentiel de **Pöschl - Teller** et **Hulthén** en utilisans la méthode de Nikiforov-Uvarov dans le cadre d'une approximation du potentiel centrifuge. La méthode de Nikiforov-Uvarov est basé sur la résolution de l'équation du second ordre en réduisant à une équation généralisée de type hypergéométrique.

4.1 Résolution de l'équation de Klein - Gordon avec un Potentiel Pöschl - Teller

La déformation quantique a reçu beaucoup d'attention à cause de sa relation avec applications dans les noyaux, la théorie statistique quantique, théorie des cordes /mon braine et conformation théorie des champs. en termes des fonctions hyperboliques à la vue de déformation q, [16]

des potentiels de cette la famille peut être écrite comme :

$$V\left(x;q\right)=-\frac{V_0}{\cosh_q^2\left(\alpha x\right)}, \tag{4.1}$$

dans la limite $q\longrightarrow 1$, k est un paramètre réel, et $e^k=q$ dans l'équation ci-dessus. le fonctions hypergéométriques à paramètre q dans l'équation (4.1) sont définis

$$\sinh_q\left(z\right)=\frac{1}{2}\left(e^z-qe^{-z}\right)\ ;\ \cosh_q\left(z\right)=\frac{1}{2}\left(e^z+qe^{-z}\right), \tag{4.2}$$

$$\tanh_q = \frac{e^z - qe^{-z}}{e^z + qe^{-z}}\,; \quad \sec h_q = \frac{2}{e^z + qe^{-z}} \tag{4.3}$$

Dans le présent travail, nous avons l'intention de résoudre de façon analytique le modèle unidimensionnelle l'équation de Klein - Gordon pour le potentiel de Pöschl-Teller de paramètre-q pour étudier l'effet de la MDP sur les faits des spectres d'énergie et les faits sur les fonctions d'onde correspondantes. Nous choisissons une exponentielle fonction de distribution de masse qui permet de résoudre analytiquement de l'équation de Klein - Gordon. Nous utilisons la généralisation paramétrique de la méthode de Nikiforov-Uvarov (NU) trouver les valeurs propres d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes. La méthode Nikiforve - Uvarof (NU) décrit la façon de résoudre une équation de type Schrödinger en la transformant en une représentation l'équation de type B hypergéométrique.

L'organisation de ce travail est la suivante. Dans la section II, nous résolvons la dimension unidimensionnelle l'équation de Klein - Gordon pour le potentiel de Pöschl -Teller à paramètre q, et donner le spectre d'énergie, et les fonctions d'onde correspondantes dans le cas d'une masse dépendant de la position. nous résumer notre conclusion à la section III.

4.1.1 Etats liés à l'équation de Klein - Gordon

L'équation de Klein - Gordon unidimensionnelle pour une particule de masse m soumise à un potentiel scalaire $V_s(x)$, et vecteur $V_\upsilon(x)$, lectures de potentiels ($\hbar = c = 1$)

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left[[E - V_\upsilon(x)]^2 - [m - V_s(x)]^2\right]\psi(x) = 0, \tag{4.4}$$

où E est l'énergie relativiste de la particule.

Nous préférons utiliser la fonction de masse égale à la partie vectorielle du potentiel

$$m(x) = m_0 + 4V_0\frac{e^{-2\alpha x}}{(1 + qe^{-2\alpha x})^2}, \tag{4.5}$$

pour obtenir une équation type de Schrödinger exactement résolue à partir de l'équation(4.4) en l'absence de potentiel scalaire. La fonction de masse devrait également être une distribution physique, de sorte que nous restreindons dans la rangée $0 \leq x \leq \infty$, qui donne les

valeurs de masse finie suivantes

$$m(x) = \left\{ \begin{array}{ll} m_0 + 2V_0\,(for\ q \longrightarrow 1)\,, & x \longrightarrow 0, \\ m_0, & x \longrightarrow \infty. \end{array} \right\} \tag{4.6}$$

En effet, cette distribution correspond à la fonction du potentiel scalaire décalé dans le problème. Substituer avec l'équation(4.1), et l'équation(4.5) dans l'équation(4.4), nous obtenons

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left\{ \left(E - m_0 + 8V_0 \frac{e^{-2\alpha x}}{(1+qe^{-2\alpha x})^2} \right) (E + m_0) \right\} \psi(x) = 0, \tag{4.7}$$

En utilisant la nouvelle variable $s = e^{-2\alpha x}$ $(0 \prec s \prec 1)$, nous avons

$$\begin{aligned} &\frac{d^2\psi(x)}{ds^2} + \frac{1+qs}{s(1+qs)}\frac{d\psi(s)}{ds} + \frac{1}{[s(1+qs)]^2} \\ &\times \left\{ \eta^2 q^2 \left(E^2 - m_0^2\right) s^2 + \left[2\eta^2 q \left(E^2 - m_0^2\right) + 8\eta^2 V_0 (E - m_0) \right] s + \eta^2 \left(E^2 - m_0^2\right) \right\} \psi(s)\,, \end{aligned} \tag{4.8}$$

où $\eta^2 = 1/4\alpha^2$, nous obtenons le jeu de paramètres

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 1 \\ \alpha_2 &= -q \\ \alpha_3 &= -q \\ \alpha_4 &= 0 \\ \alpha_5 &= \frac{q}{2} \\ \alpha_6 &= \xi_1 + \frac{q^2}{4} \\ \alpha_7 &= -\xi_2 \\ \alpha_8 &= \xi_3 \\ \alpha_9 &= \xi_1 + q\xi_2 + q^2\xi_3 + \frac{1}{4}q^2 \\ \alpha_{10} &= 1 + 2\sqrt{\xi_3} \\ \alpha_{11} &= -2q + 2\left(\sqrt{\xi_1 + q\xi_2 + q^2\xi_3 + \frac{1}{4}q^2} - q\sqrt{\xi_3} \right) \\ \alpha_{12} &= \sqrt{\xi_3}, \\ \alpha_{13} &= \frac{q}{2} - \left(\sqrt{\xi_1 + q\xi_2 + q^2\xi_3 + \frac{1}{4}q^2} - q\sqrt{\xi_3} \right) \end{aligned} \tag{4.9}$$

où

$$\begin{aligned} -\xi_1 &= \eta^2 q^2 \left(E^2 - m_0^2\right) \\ \xi_2 &= 2\eta^2 q \left(E^2 - m_0^2\right) + 8\eta^2 V_0 \left(E - m_0\right) \\ -\xi_3 &= \eta^2 \left(E^2 - m_0^2\right) \end{aligned}$$

et nous déduisons les paramètres requis pour la méthode

$$\begin{aligned} \pi\left(s\right) &= \frac{1}{2}q \pm \{ \left[\frac{1}{4}q^2 - 2q\sqrt{\eta^2\left(m_0^2 - E^2\right)\left[8V_0\eta^2 q\left(E - m_0\right) + \frac{1}{4}q^2\right]}\right] s^2 \\ &- \left[2\eta^2 q\left(E^2 - m_0^2\right) - 2\sqrt{\eta^2\left(m_0^2 - E^2\right)\left[8V_0\eta^2 q\left(E - m_0\right) + \frac{1}{4}q^2\right]}\right] s \\ &-\eta^2\left(E^2 - m_0^2\right)\}^{1/2} \end{aligned} \tag{4.10}$$

$$k = 2\sqrt{\eta^2\left(m_0^2 - E^2\right)\left[8V_0\eta^2 q\left(E - m_0\right) + \frac{1}{4}q^2\right]}, \tag{4.11}$$

$$\begin{aligned} \tau\left(s\right) &= 1 - 2qs - 2\{\left[\sqrt{8V_0\eta^2 q\left(E - m_0\right) + \frac{1}{4}q^2} - q\sqrt{\eta^2\left(m_0^2 - E^2\right)}\right] s \\ &-\sqrt{\eta^2\left(m_0^2 - E^2\right)}\} \end{aligned} \tag{4.12}$$

Nous devons savoir λ et λ_n

$$\lambda = -2\sqrt{\eta^2\left(m_0^2 - E^2\right)\left[8V_0\eta^2 q\left(E - m_0\right) + \frac{1}{4}q^2\right]} + \pi'\left(s\right), \tag{4.13}$$

$$\begin{aligned} \lambda_n &= -n\left[-2q - 2\sqrt{8V_0\eta^2 q\left(E - m_0\right) + \frac{1}{4}q^2} + 2q\sqrt{\eta^2\left(m_0^2 - E^2\right)}\right] \\ &-qn\left(n-1\right), \end{aligned} \tag{4.14}$$

pour obtenir l'équation de valeur propre pour les spectres d'énergie du potentiel de Pöschl

- Teller de paramètre-q comme

$$\frac{1}{\alpha}\sqrt{m_0^2-E^2}+\sqrt{\frac{1}{4}+\frac{2V_0}{q\alpha^2}\left(E-m_0\right)}=n+\frac{1}{2}, \tag{4.15}$$

ce qui donne deux solutions indépendantes correspondant aux états des particules et des antiparticules. Ce l'équation donne $E=\pm m_0$ pour le cas de masse constante lorsque le potentiel s'annule. Les fonctions propres non normalisées correspondantes sont obtenues en fonction des fonctions suivantes

$$\rho\left(s\right)=s^{2\sqrt{\eta^2\left(m_0^2-E^2\right)}}\left(1+qs\right)^{-2\sqrt{\frac{8}{q}V_0\eta^2(E-m_0)+\frac{1}{4}}}, \tag{4.16}$$

$$y_n\left(s\right)=P_n^{\left(2\sqrt{\eta^2\left(m_0^2-E^2\right)},-2\sqrt{\frac{8}{q}V_0\eta^2(E-m_0)+\frac{1}{4}}\right)}\left(1+2qs\right), \tag{4.17}$$

et

$$\phi\left(s\right)=s^{\sqrt{\eta^2\left(m_0^2-E^2\right)}}\left(1+qs\right)^{-\frac{1}{2}-\sqrt{\frac{8}{q}V_0\eta^2(E-m_0)+\frac{1}{4}}}, \tag{4.18}$$

comme

$$\psi_n\left(s\right)=\alpha_n s^{\sqrt{\eta^2\left(m_0^2-E^2\right)}}\left(1+qs\right)^{-\frac{1}{2}-\sqrt{\frac{8}{q}V_0\eta^2(E-m_0)+\frac{1}{4}}}$$

$$\times P_n^{\left(2\sqrt{\eta^2\left(m_0^2-E^2\right)},-2\sqrt{\frac{8}{q}V_0\eta^2(E-m_0)+\frac{1}{4}}\right)}\left(1+2qs\right). \tag{4.19}$$

où an est une constante de normalisation. Les fonctions propres dépendent le polynômes de Jacobi $P_n^{(\alpha,\,\beta)}\left(x\right)$. Le comportement asymptotique de la fonction d'onde pourrait être donné dans limites $s\longrightarrow 0$ comme

$$\psi_n\left(s\right)\longrightarrow 0, \tag{4.20}$$

parce que $P_n^{(\alpha,\,\beta)}\left(1\right)=\frac{\Gamma(\alpha+n+1)}{n!\Gamma(1+\alpha)}$, et nous écrivons la fonction d'onde pour $s\longrightarrow 0$ comme

$$\psi_n\left(s\right)\sim P_n^{(\alpha,\,\beta)}\left(1+2q\right), \tag{4.21}$$

où une solution physique peut être obtenue seulement pour $-1\prec q\preceq 1$.

4.2 Résolution de l'équation de Klein - Gordon avec un potentiel de Hulthén

Dans la section II, nous résolvons la partie radiale de l'équation Klein - Gordon en utilisant une approximation pour le terme centrifuge, et calculer les valeurs propres d'énergie des états liés et les fonctions propres correspondantes. Les valeurs propres de l'énergie et les fonctions propres correspondantes du modèle unidimensionnel de l'équation Klein - Gordon avec le potentiel de paramètre-q est analytiquement obtenue dans le formalisme de masse dépendant de la position. La généralisation paramétrique de la méthode de Nikiforov-Uvarov est utilisé dans les calcules en choisissant une distribution de masse.[15]

4.2.1 Procèder Nikiforov-Uvarov et l'états liés

La partie radiale de l'équation Klien - Gordon se lit

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l\left(l+1\right)}{r^2}-\frac{1}{\hbar^2c^2}\left[m^2c^4-\left(E-v\right)^2\right]\right\}\phi\left(r\right)=0,\quad\left(0\leq r\leq\infty\right) \tag{4.22}$$

où l est le nombre quantique du moment angulaire, E est l'énergie de la particule, c est le la vitesse de la lumière.

Le potentiel Hulthén a la forme:

$$V\left(r\right)=-V_0\frac{e^{-\beta r}}{1-e^{-\beta r}}. \tag{4.23}$$

où V_0, et $\beta\equiv1/a$ sont des paramètres constants.

l'équation (4.22) ne peut pas être résolu exactement à cause du potentiel centrifuge. Donc, il faut utiliser une approximation pour ce terme. Cette approximation peut être considérée comme :

$$\frac{l\left(l+1\right)}{r^2}\simeq\beta^2l\left(l+1\right)\frac{e^{-\beta r}}{\left(1-e^{-\beta r}\right)^2}, \tag{4.24}$$

1. Il y a très différentes distributions de masse sont utilisées dans la littérature, comme une exponentielle, et quadratique des fonctions de masse, distributions de masse trigonométriques et masse fonctions des formes $m(r)=r\alpha$ où $\alpha\succ0$, en particulier pour les problèmes

tridimensionnels. Ici, nous préfèrent utiliser la masse spatialement dépendante suivante

$$mr = m_0 - \frac{m_1}{1 - e^{-\beta r}}, \qquad (m_0 > m_1)\,. \tag{4.25}$$

Ce qui correspond à une particule de décroissance, et nous fournit une solution approximative de la partie radiale de l'équation de Klien - Gordon efficace. m_0 et m_1 dans cette distribution sont deux paramètres positifs arbitraires . La fonction de masse de cette forme nous permet de vérifier les résultats dans le limite de la masse constante.

2. Il est bien connu que l'équation de Schrödinger devrait être reproduite dans le cas d'une masse dépendant de la position, en raison de l'ordre-ambigu problème entre l'impulsion, et les opérateurs de masse en terme d'énergie cinétique. L'énergie cinétique terme devrait être écrit comme $p\frac{1}{2m(x)}p$. Lorsque la masse dépend des coordonnées.

Le problème d'ordre-ambiguïté n'apparaît pas dans le cas de l'équation Klien - Gordon. Substituer des équations(4.23)et(4.25) dans l'équation(4.22), et en utilisant l'équation(4.24), nous obtenons

$$\left\{ \begin{array}{c} \frac{d^2}{dr^2} - \beta^2 l\,(l+1)\,\frac{e^{-\beta r}}{\left(1-e^{-\beta r}\right)^2} + \frac{1}{\hbar^2 c^2} \\ \left[\begin{array}{c} E^2 + 2EV_0\frac{e^{-\beta r}}{\left(1-e^{-\beta r}\right)^2} - m_0^2 c^4 \\ + \frac{2m_0 m_1 c^4}{1-e^{-\beta r}} - \frac{m_1^2 c^4}{\left(1-e^{-\beta r}\right)^2} \end{array} \right] \end{array} \right\} \phi\,(r) = 0. \tag{4.26}$$

En utilisant la transformation $z = 1 - e^{-\beta r}$ $(0 \leq z \leq 1)$, on obtient

$$\frac{d^2\phi\,(z)}{dz^2} - \frac{z}{z\,(1-z)}\frac{d\phi\,(z)}{dz} + \frac{1}{\left[z\,(1-z)\right]^2}\left[-a_1^2 z^2 - a_2^2 z - a_3^2\right]\phi\,(z) = 0, \tag{4.27}$$

Où

$$-a_1^2 = Q^2\left(E^2 - 2EV_0 + V_0^2 - m_0^2 c^4\right).$$

$$-a_2^2 = Q^2\left(2m_0 m_1 c^4 + 2EV_0 - V_0^2\right) + l\,(l+1)\,.$$

$$-a_3^2 = Q^2\left(V_0^2 - m_1^2 c^4\right) - l\,(l+1) \tag{4.28}$$

et $Q^2 = 1/\beta^2\hbar^2 c^2$. Maintenant, pour appliquer la méthode Nikiforv-Uvarov (NU), nous réécrivons équation(4.27) dans le texte de la forme suivant

$$\phi'(z) + \frac{\widetilde{\tau}\,(z)}{\sigma\,(z)}\phi'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}\,(z)}{\sigma\,(z)}\phi\,(z) = 0. \tag{4.29}$$

où $\sigma(z)$ et $\widetilde{\sigma}(z)$ sont des polynômes de second degré, au plus, et $\widetilde{\tau}(z)$ est un polynôme avec le premier degré. Nous définissons une transformation pour la fonction d'onde totale

$$\phi(z) = \varepsilon(z)\,\psi(z). \tag{4.30}$$

Ainsi équation(4.29) est réduit à une équation de type hypergéométrique

$$\sigma(z)\,\psi'(z) + \tau(z)\,\psi'(z) + \lambda\psi(z) = 0 \tag{4.31}$$

Nous définissons également la nouvelle valeur propre pour l'équation(4.29) comme :

$$\lambda = \lambda_n = -nr' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma^n.\,(n = 0, 1, 2, ...) \tag{4.32}$$

où

$$\tau(z) = \widetilde{\tau}(z) + 2\pi z. \tag{4.33}$$

La dérivée de $\tau(z)$ doit être négative. $\lambda\,(\lambda_n)$ est obtenu à partir d'une solution particulière du polynôme $\Psi_n(z)$ avec le degré de n. $\Psi_n(z)$ est la fonction de type hypergéométrique dont les solutions sont données par

$$\Psi_n(z) = \frac{b_n}{p(z)}\frac{d^n}{dz^n}\left[\sigma^n(z)\,\rho(z)\right], \tag{4.34}$$

où la fonction de poids $\rho(z)$ satisfait l'équation

$$\frac{d}{dz}\left[\sigma(z)\,p(z)\right] = \tau(z)\,\rho(z). \tag{4.35}$$

D'autre part, la fonction $\varepsilon(z)$ vérifie la relation

$$\varepsilon(z)/\varepsilon(z) = \pi(z)/\sigma(z). \tag{4.36}$$

Comparaison de l'équation (4.27) avec l'équation (4.29), nous avons

$$\widetilde{\tau}(z) = -z, \quad \sigma(z) = z(1-z), \quad \widetilde{\sigma}(z) = -a_1^2 z^2 - a_2^2 z - a_3^2 \tag{4.37}$$

Le $\pi(z)$ a la forme

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \sigma'(z) + k\sigma(z)} \tag{4.38}$$

ou, explicitement

$$\pi(z) = \frac{1}{2}(1-z) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{4} + a_1^2 - k\right) z^2 + \left(a_2^2 + k\frac{1}{2}\right) z + a_3^2 + \frac{1}{4}}, \tag{4.39}$$

La constante k est déterminée en imposant une condition telle que le discriminant sous la racine carrée devrait être zéro. Les racines de k sont $k_{1,2} = -a_2^2 - 2a_3^2 \pm A\sqrt{1+4a_3^2},$.

En substituant ces valeurs dans l'équation (4.39), on obtient $\pi(z)$

$$\pi(z)(k \to k_1) = \frac{1}{2}(1-z) \pm \left[\left(A - \sqrt{\frac{1}{4} + a_3^2}\right) z - \sqrt{\frac{1}{4} + a_3^2}\right], \tag{4.40}$$

et

$$\pi(z)(k \to k_1) = \frac{1}{2}(1-z) \pm \left[\left(A + \sqrt{\frac{1}{4} + a_3^2}\right) z - \sqrt{\frac{1}{4} + a_3^2}\right], \tag{4.41}$$

On calcule maintenant le polynôme $\tau(z)$ de $\pi(z)$ tel que sa dérivée par rapport à z doit être négatif. Nous prenons donc le premier choix

$$\tau(z) = 1 - 2\sqrt{\frac{1}{2} + a_3^2 - 2\left(A - \sqrt{\frac{1}{4} + a_3^2} + 1\right) z}. \tag{4.42}$$

La constante $\lambda = k + \pi'(z)$ devient :

$$\lambda = -a_2^2 - 2a_3^2 + A\sqrt{1+4a_3^2} - \frac{1}{2} - \left(A - \sqrt{\frac{1}{4} + a_3^2}\right), \tag{4.43}$$

et l'équation(4.32) nous donne

$$\lambda_n = 2n\left(A - \sqrt{\frac{1}{4} + a_3^2} + 1\right) + n^2 - n \tag{4.44}$$

Substituer les valeurs des paramètres donnés par l'équation(4.28), et en définissant $\lambda = \lambda_n$,

on peut trouver les valeurs propres d'énergie comme

$$\begin{aligned} E_{nl} &= \frac{V_0}{2}+\frac{1}{4Q^2\left(N^2+4Q^2V_0^2\right)}\{8Q^3m_1c^4\left(m_1-2m_0\right) \\ &\pm N[16Q^4\left(V_0^2-m_1c^4\right)\left(m_1^2c^4-4m_0m_1c^4+4m_0^2c^4-V_0^2\right) \\ &+8Q^2N^2\left(2m_0^2c^4-2m_0m_1c^4+m_1^2c^4-V_0^2\right)-N^4]^{1/2}\}, \end{aligned} \tag{4.45}$$

où

$$N=(2n+1)+\sqrt{1+4a_3^2}. \tag{4.46}$$

Nous voyons que les niveaux d'énergie pour les particules et les antiparticules sont symétriques, et le sol l'énergie de l'état est différente de zéro.

Nous obtenons les fonctions propres également d'énergie pour le cas de masse constante pour les états s

$$E_{n,l=0}^{m_1=0}=\frac{V_0}{2}\pm N'\sqrt{\frac{m_0^2c^2}{4Q^2V_0^2+N^2}-\frac{1}{16Q^2}}, \tag{4.47}$$

où

$$N'=(2n+1)+\sqrt{1-4Q^2V_0^2}. \tag{4.48}$$

C'est le même résultat avec ceux de la littérature pour $q=1$. Maintenant, trouvons les fonctions propres. Nous calculons d'abord la fonction de poids à partir des équations(4.33) et(4.35)

$$\rho\left(z\right)=z^{\sqrt{1+4a_3^2}}\left(1-z\right)^{2A}, \tag{4.49}$$

et les fonctions d'onde deviennent

$$\psi_n\left(z\right)=\frac{b_n}{z^{\sqrt{1+4a_3^2}}\left(1-z\right)^{2A}}\frac{d^n}{dz^n}\left[z^{n+\sqrt{1+4a_3^2}}\left(1-z\right)^{n+2A}\right]. \tag{4.50}$$

où b_n est une constante de normalisation. Les solutions polynomiales peuvent être écrites en termes de les polynômes de Jacobi

$$\psi_n\left(z\right)=b_nP_n^{\left(\sqrt{1+4a_3^2},2A\right)}\left(1-2z\right), \qquad 2A>-1, \quad \sqrt{1+4a_3^2}>-1. \tag{4.51}$$

D'autre part, l'autre partie de la fonction d'onde est obtenue à partir de l'équation(4.36) comme

$$\zeta\left(z\right)=z^{\frac{1}{2}\left[1+\sqrt{1+4a_3^2}\right]}\left(1-z\right)^{A}. \tag{4.52}$$

Ainsi, les fonctions propres totales prennent..

$$\phi_n(z) = b_n{}'(1-z)^A z^{\frac{1}{2}\left[1+\sqrt{1+4a_3^2}\right]} P_n^{\left(\sqrt{1+4a_3^2},2A\right)}(1-2z). \tag{4.53}$$

où b_n' est la nouvelle constante de normalisation. Fonction d'onde totale pour le cas de masse constante pour tout état$l$

$$\phi_{n,l}^{m_1=0}(z) = b'(1-z)^{A'} z^{\frac{1}{2}\left[1+\sqrt{1+4a_3^2}\right]} P_n^{\left(\sqrt{1+4a_3^2},2A'\right)}(1-2z). \tag{4.54}$$

Les paramètres pour ce cas sont donnés par $A' = \sqrt{a_3^2 + a_2^2 + a_1^2}$, et

$$\begin{aligned} a_1^2 &= a_1^2, \\ a_2^2 &= 4Q^2 4Q^2 V_0 (V_0 - E) - l(l+1), \\ a_3^2 &= -Q^2 V_0^2 + l(l+1). \end{aligned} \tag{4.55}$$

Nous avons résolu analytiquement l'équation de Klein - Gordon pour le potentiel Pöschl - Teller paramètre-q dans une dimension dans le cas d'une fonction de masse dépendant de la position. Nous obtenons une fonction propre de l'énergie, qui donne des états de particule et d'antiparticule, en utilisant le paramétrique généralisation de la méthode Nikiforov-Uvarov, et obtenir les fonctions propres correspondantes en termes de Polynômes de Jacobi. Nous étudions également les spectres d'énergie pour le cas où la masse est constante et les disparitions potentielles. Enfin, nous donnons le comportement de la fonction d'onde correspondante à zéro.

Nous avons obtenu une solution approximative de la partie radiale de l'équation de Klein - Gordon de masse effective pour le potentiel d'Hulthén dans le cadre d'une approximation du terme centrifuge pour toutes les valeurs l. Nous avons obtenu les spectres d'énergie et la partie radiale correspondante des fonctions d'onde en appliquant la méthode Nikiforov-Uvarov. Nous avons trouvé un véritable spectre d'énergie pour le potentiel Hulthén dans le cas PDM. Pour vérifier nos résultats, nous avons également calculé les valeurs propres d'énergie et les fonctions propres de la particule et des antiparticules dans le cas de limite de masse constante pour les ondes s, et vu que les résultats sont compatibles avec ceux de la littérature.

Conclusion

Le but essentiel de ce mémoire est la résolution de l'équation de Klein-Gordon par la méthode de Nikiforov-Uvarov pour des systèmes à masses dépendent de la position. Pour cela nous avons rappelé les propriétés des équations de Klein-Gordon et de Dirac. Nous avons ensuite présenté la méthode de résolution de Nikiforov-Uvarov d'une EDO du second ordre. Comme illustration de la méthode NU nous avons choisi le cas de la résolution de l'équation de Klein-Gordon et de celle de Schrödinger pour un champ coulombien. Par la suite on s'est intéressé aux propriétés fondamentales d'un système quantique dont la masse varie en fonction de la position, en particuliers les problèmes liés au choix des paramètres d'ambiguïté contenus dans l'hamiltonien effectif. Tout cela nous a permis de finalement aborder la résolution via la méthode NU de l'équation de Klein-Gordon pour deux potentiels physiques d'une grande importance et aussi avec des masses dépendant de la position. ll s'est agi des potentiels de Pöschl - Teller q-déformé et du potentiel de Hulthén. Les spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde propres pour ces deux systèmes ont été finalement présentés.

Bibliographie

[1] J.M. Levy-Leblond, "*Elementary quantum models with position-dependent mass*" European Journal of Physics, volume 13, (1992).

[2] L. Dekar, L. Chetouani, T.F. Hammann, J. Math. Phys. 39. 2551 ; (1998).L. Dekar, L. Chetouani, T.F. Hammann, Phys. Rev. A 59. 107, (1999).

[3] Mémoire de magister de Bouferrache Karim" *Calcul des coefficients de transmission pour une barrière trapézoïdale en potentiel et en masse pour l'hamiltonien généralisé à des masses dépendant de la position"* université de Médéa Algérie(2011).

[4] Mémoire de magister de Langueur Omar" *Résolution de l'équation de Schrödinger pour une double barrière trapézoïdale en potentiel et en masse*" université de Médéa Algérie(2013).

[5] D.Cheteigner Mesures physiques IUT Caen(2003).

[6] Daniel Farquet section de Physique EPFL travail présenté à Claudio Scrucca"*Klein-Gordon et Dirac en physique quantique relativiste*" 05. 04. 2013, (http : //daniel. farquet. com/up-content/uploads/).

[7] A.NIKIFOROV et V.OUVAROV "*Fonctions Spéciales de la Physique Mathématique"* édition Mir.Moscou 1983.

[8] D. J. Ben Daniel et C. B. Duke (1966).

[9] T. Gora, F. Williams, Phys, 1968.

[10] O. von Roos " *Position - dependent effective masses in semiconductor theory*", Phy. Rev. B27. 7547, (1983).

[11] . M. Levy-Leblond, Phys. Rev., A52. 1845, (1995).

[12] L. Chetouani, L. Dekar, T.F. Hammann, Phys. Rev. A 52. 82, (1995).

[13] A. de Souza Dutra, C.A.S. Almeida, Phys. Lett. A 275. 25, (2000).

[14] O. Mustafa, S. Habib Mazharimousavi, Int. J. Theory. Phys. 46. 1786, (2007).

[15] Altuğ Arda et Ramazan Sever and Cevdet Tezcan"*Analytical Solutions of Klein-Gordon Equation with Position-Dependent Mass for q-parameter Pöschl-Teller potential*" arXiv :0911.4558v1 [quant-ph] 24 Nov 2009.

[16] Altuğ Arda et Ramazan Sever *"Approximate Solution of the effective mass Klein-Gordon Equation for the Hulthén Potential with any Angular Momentum*" arXiv :0810.0762v1 [quant-ph] 2008.

[17] M.Khiyer - A.Morsli "*Équation de Dirac appliquée à des systèmes à masses dépendant de la position dans un champ coulombien*" mémoire de master université de Médéa Algérie(2015).