

Université Mohamed Boudiaf - M'sila



FACULTÉ DES SCIENCES
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE



Order N°:.....

Thèse

Pour obtenir le diplôme de

DOCTORAT en Sciences

Domaine : Physique

Option: Physique Théorique

Présenté par:

Debabi Mourad

Thème

Non Commutativité de l'Espace et Les Différents Types d'Interactions

Soutenue le : **09/04/2025**

Devant le jury composé de :

Maireche Abdelmadjid	Professeur	Université de M'sila	Président
Boussahel Mounir	Professeur	Université de M'sila	Superviseur et rapporteur
Redouane Salah Essma	Professeur	Université de M'sila	Examineur
Bekkar Hacene	Professeur	Université de Setif	Examineur
Menouar Salah	Professeur	Université de Setif	Examineur
Ferkous Nouredine	MCA	Université de Jijel	Examineur

Année académique : **2024/2025**

Dédicace

J'adresse ce travail avant tout à mon père, que Dieu ait son âme, et à ma chère mère, que Dieu lui accorde une longue vie. Je tiens à exprimer ma gratitude infinie pour leur amour inconditionnel, leur soutien indéfectible et leurs encouragements constants tout au long de mes études.

Je dédie également cette thèse à toute ma famille, et tout particulièrement à mon épouse bien-aimée. Leur soutien affectueux et leur présence chaleureuse ont illuminé les moments difficiles que j'ai traversés durant mes études. Leur amour et leur bienveillance m'ont toujours entouré et m'ont encouragé à poursuivre ce chemin avec confiance et détermination.

Ce succès, je le dédie aussi à tous mes chers amis, qui ont partagé avec moi joies, difficultés et précieux souvenirs. À vous, je dédie ce succès.

Remerciements

Tout d'abord, louange et gratitude à Dieu Tout-Puissant, qui nous a donné la patience, la persévérance et la force nécessaires pour mener à bien ce travail. Sans Sa grâce et Sa miséricorde, rien de tout cela n'aurait été possible.

Je souhaite exprimer ma profonde reconnaissance et mon respect sincère envers le **Professeur : BOUSSAHEL Mounir**, directeur de cette thèse. Son soutien constant, sa disponibilité et son encouragement ont été des piliers sur lesquels j'ai pu m'appuyer tout au long de ce parcours. Sa bienveillance, son enthousiasme et son expertise ont enrichi mon travail au-delà de toute attente, et pour cela, je lui suis profondément redevable. Son encadrement rigoureux, alliant exigence et compréhension, m'a permis de dépasser mes propres limites et de développer une vision scientifique plus approfondie.

Mes sincères remerciements s'adressent tout particulièrement aux membres du jury. Je tiens à exprimer ma profonde gratitude pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant d'examiner cette thèse et de faire partie de ce jury. Leur implication, malgré leurs nombreuses responsabilités et obligations professionnelles, témoigne de leur dévouement à la recherche scientifique. Je mesure pleinement la valeur du temps qu'ils ont consacré à

l'évaluation de mon travail, à l'analyse minutieuse de mes résultats, et à la préparation de leurs observations. Leurs précieuses remarques. Je vous suis infiniment reconnaissante

Mes remerciements vont également à mon ami et collègue, **le Professeur : Heraiz Menad**, qui a toujours été à mes côtés avec un soutien indéfectible. Son amitié, ses encouragements constants et ses conseils avisés m'ont été d'une aide précieuse.

Enfin, je souhaite exprimer ma gratitude à toutes les personnes, proches et moins proches, qui ont contribué, de près ou de loin, à la préparation de cette thèse. Que ce soit par leurs mots d'encouragement, leurs conseils ou simplement par une présence amicale, chacun a joué un rôle dans l'aboutissement de ce projet. Un simple sourire ou un mot bienveillant a souvent suffi pour redonner du courage et raviver ma détermination.

À toutes et à tous, du fond du cœur, merci.

Table des matières

dédicace	i
Remerciements	iii
Table des matières	v
Table des figures	xi
Liste des figures	xi
Introduction Générale	1
1 Introduction à la Mécanique Quantique	5
1.1 Histoire Brève de la Mécanique Quantique	5
1.2 Équation de Schrödinger	7
1.2.1 Fonction d'Onde d'une Particule Matérielle	7
1.2.2 Ondes de De Broglie	7
1.2.3 Équation de Schrödinger Dépendante du Temps	8
1.2.4 États Stationnaires (Potentiels Indépendants du Temps)	9

1.2.4.1	Propriétés de l'Équation de Schrödinger	9
1.3	Mouvement dans un Potentiel Central	9
1.3.1	Introduction	9
1.3.2	Équation Radiale	11
1.3.3	Propriétés des Solutions et Conditions aux Limites	12
1.4	Atome d'Hydrogène	13
1.4.1	Description du Système	13
1.4.2	Équation Radiale	14
1.4.3	Unités Naturelles	15
1.4.4	Résolution de l'Équation Radiale	15
1.4.4.1	Solution Asymptotique	15
1.4.4.2	Solution Générale	15
1.4.5	Quantification des Niveaux d'Énergie	16
1.4.6	Fonctions d'Onde Radiales	16
1.4.7	Niveaux d' Energie et Fonctions d' Onde	17
1.5	Méthodes d' Approximations	19
1.5.1	Théorie des Perturbations Stationnaires	19
1.5.2	Développement des Etats et des Energies Propres	20
1.5.3	Perturbation d' Un Niveau Non Dégénéré	22
1.5.3.1	Correction de l' Energie au 1 ^{er} Ordre	22
1.5.3.2	Correction de l'Etat au 1 ^{er} Ordre	22
1.5.3.3	Correction de l'Énergie au 2 ^{ème} Ordre	23

1.5.4	Méthode des Variations	23
1.6	Effet Zeeman	25
2	Espace Non-Commutatif	31
2.1	Introduction	31
2.1.1	Objectifs et Applications	32
2.2	Algèbre d'Espace-Temps Non-Commutatif	32
2.3	La Quantification de Weyl et le Produit de Moyal	34
2.3.1	La Quantification de Weyl	34
2.3.2	Le Produit de Moyal (Produit Star)	34
2.3.2.1	Démonstration	35
2.3.3	Propriétés du Produit Star	36
2.4	L'équation de Schrödinger en espace non commutatif	38
2.5	Le Décalage de Bopp	39
2.5.1	Démonstration des relations de commutation	40
2.6	L'Atome d'Hydrogène en Espace Non Commutatif	40
2.6.1	Introduction et Hamiltonien de Base	40
2.6.2	Transformation Non Commutative	41
2.6.3	Développement Perturbatif du Potentiel	41
2.6.4	Hamiltonien Effectif	42
2.6.5	Corrections Energétiques	42
3	Solution de l'Equation de Schrödinger à Potentiel de Kratzer en Espace Non	

Commutatif	43
3.1 Introduction	43
3.1.1 Le potentiel de Kratzer	45
3.1.2 Applications et intérêt scientifique	46
3.2 Résolution de l'équation de Schrödinger avec potentiel de Kratzer	46
3.2.1 Formulation du problème	46
3.2.2 Analyse asymptotique	47
3.2.2.1 Comportement à l'infini ($x \rightarrow \infty$)	47
3.2.2.2 Comportement à l'origine ($x \rightarrow 0$)	47
3.2.3 Solution générale	47
3.3 Spectre d'énergie	48
3.3.1 États liés ($E < 0$)	48
3.3.2 États de diffusion ($E > 0$)	49
3.4 Interprétation physique	49
3.5 Solution de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Kratzer dans un espace non commutatif	49
3.5.1 Etude de la Partie Angulaire	52
3.5.2 Etude de la Partie Radiale	52
3.5.3 Correction des energies pour le potentiel de Kratzer dans le cas NC	53
3.5.4 Spectre d'énergie du potentiel de Kratzer en espace non commutatif	60
3.5.4.1 Corrections énergétiques pour $n=1$ et $l=1$	60
3.5.4.2 Considération du moment angulaire total	61

3.5.4.3	Expression générale des corrections énergétiques	61
3.5.4.4	Expression finale des corrections	61
3.6	Couplage Spin-Orbite et Structure Fine	62
3.6.1	Origine de la structure fine	62
3.6.2	Le Décalage de Lamb et la Correction Non Commutative	63
4	Solution de L'équation de Schrödinger Pour les Atomes Hydrogénoïde	67
4.1	Introduction	67
4.1.1	Atomes Muoniques	67
4.1.2	Atome d'Hélium	68
4.2	Atomes Hydrogénoïdes de Type Muonique	68
4.2.1	Hamiltonien du Système	68
4.3	Atome Hydrogénoïde dans un Espace Non Commutatif	70
4.3.1	Potentiel Muonique dans un Espace Commutatif	70
4.3.2	Potentiels muoniques dans un espace non commutatif	71
4.3.2.1	Etude de la Partie Angulaire	74
4.3.2.2	Etude de la Partie Radiale	74
4.3.2.3	Comportement Asymptotique pour $r \rightarrow \infty$	75
4.3.2.4	Comportement asymptotique pour $r \rightarrow 0$	76
4.4	Atome d'Hélium en Espace Non-Commutatif	77
5	Conclusion Générale	95

Bibliographie

97

Table des figures

1.1	Potentiel effectif intervenant dans l'équation de Schrödinger uni dimensionnelle	12
1.2	Potentiel effectif $V_{eff}(r)$ en fonction de r pour $l = 0, 1$	14
1.3	Spectre de l'atome d'hydrogène	18
1.4	Modifications des niveaux d'énergie s et p dues à l'effet Zeeman	29
3.1	Kratzer potential	45
3.2	Spectre de la molécule de Kratzer dans les espaces non commutatifs	65
4.1	Définition des coordonnées de l'atome d'hélium	79

Introduction Générale

Depuis le début du XX^e siècle, la physique théorique a connu une profonde transformation, portée par deux révolutions majeures : la mécanique quantique et la relativité restreinte, puis générale. Ces théories ont radicalement modifié notre compréhension de l'espace, du temps et de la matière. Toutefois, malgré leurs succès remarquables, elles demeurent structurellement incompatibles lorsqu'on cherche à les unifier dans un cadre unique cohérent, notamment aux échelles de longueur extrêmement petites, proches de l'échelle de Planck [1, 2].

Dans ce contexte, l'idée que la structure de l'espace-temps pourrait être profondément modifiée à ces échelles a été proposée dès 1947 par H.S. Snyder [3], qui introduisit une formulation dans laquelle les coordonnées spatiales ne commutent plus. Cette hypothèse, d'abord marginale, a regagné de l'intérêt avec l'essor des théories modernes des cordes. En particulier, les travaux de Seiberg et Witten [4] ont montré que certaines théories de jauge formulées sur des variétés non commutatives émergent naturellement comme des limites à basse énergie de configurations de branes dans la théorie des cordes. Cette correspondance confère ainsi un fondement physique solide à la non-commutativité, en la reliant à des structures géométriques profondes.

De cette manière, la notion d'espace non commutatif (ENC) s'est imposée comme un cadre mathématique et physique prometteur pour explorer la physique aux hautes énergies. L'idée selon laquelle les coordonnées de l'espace-temps pourraient ne plus commuter constitue une extension naturelle du principe d'incertitude d'Heisenberg, et trouve une justification rigoureuse dans les formulations de la géométrie non commutative [5].

L'espace non commutatif s'est révélé particulièrement fécond dans de multiples domaines

de la physique théorique : théorie quantique des champs, modèles de jauge, gravité quantique, cosmologie, et physique des particules. En mécanique quantique non commutative (MQNC), des systèmes élémentaires tels que l'atome d'hydrogène ou l'oscillateur harmonique isotrope présentent des corrections notables à leurs spectres énergétiques classiques [6].

Sur le plan technique, la résolution de l'équation de Schrödinger dans un espace non commutatif nécessite l'usage d'outils mathématiques spécifiques, tels que la transformation de Bopp (*Bopp shift*), qui permet de réexprimer les opérateurs non commutatifs dans un formalisme effectif commutatif, tout en conservant les informations liées à la déformation [7]. Cette approche facilite les calculs analytiques et permet une interprétation physique transparente des corrections induites.

La présente thèse s'inscrit dans ce cadre conceptuel. Elle vise à étudier les effets de la non-commutativité spatiale sur des systèmes quantiques soumis à différents types de potentiels centraux. L'accent est mis sur la résolution de l'équation de Schrödinger dans un espace non commutatif, pilier de la mécanique quantique non relativiste, ainsi que sur l'analyse comparative entre les cas commutatif et non commutatif.

Les systèmes étudiés incluent notamment le potentiel de Kratzer et les atomes hydrogénoïdes. Ces choix sont motivés par leur solvabilité analytique relative et leur importance fondamentale en physique atomique et moléculaire. Leur traitement dans un cadre non commutatif permet d'étudier :

- les déformations spectrales induites par la non-commutativité,
- les modifications des fonctions d'onde associées,
- et les conséquences sur les structures fines des niveaux d'énergie.

Des phénomènes fondamentaux tels que le décalage de Lamb et le couplage spin-orbite sont également revisités sous l'angle de la non-commutativité [6].

La méthodologie adoptée combine les outils de la mécanique quantique (formalisme de Schrödinger, théorie des perturbations stationnaires, méthode variationnelle, effets magnétiques) à ceux de la géométrie non commutative (produit de Moyal, quantification de Weyl,

algèbres déformées). L'originalité de cette thèse réside dans son approche comparative rigoureuse, visant à isoler les effets spécifiques de la non-commutativité à partir d'une étude parallèle dans les deux cadres géométriques. Cette démarche permet d'extraire des corrections quantitatives aux niveaux d'énergie, aux structures fines, ainsi qu'à la distribution de probabilité des états quantiques.

Ce travail est structuré en quatre chapitres principaux, allant des fondements théoriques aux applications concrètes sur des systèmes physiques :

Dans un premier temps, nous rappelons les concepts fondamentaux de la mécanique quantique, en mettant l'accent sur l'évolution historique ayant conduit à l'équation de Schrödinger. Nous abordons également le mouvement dans un potentiel central, l'étude de l'atome d'hydrogène, et les méthodes d'approximation telles que les perturbations stationnaires, la méthode variationnelle, ainsi que l'effet Zeeman.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude de l'espace non commutatif et de ses fondements mathématiques : quantification de Weyl, produit de Moyal, algèbres non commutatives. L'équation de Schrödinger y est généralisée via la méthode du *Bopp shift*, avec une application spécifique à l'atome d'hydrogène.

Ensuite, nous utilisons les résultats précédents pour étudier le potentiel de Kratzer dans le cadre de la géométrie non commutative, modèle pertinent pour la description de molécules diatomiques. Les corrections aux niveaux d'énergie sont calculées, et l'impact de la non-commutativité sur la structure fine est analysé.

Enfin, dans le quatrième chapitre, nous étudions la résolution de l'équation de Schrödinger pour des systèmes d'atomes hydrogénoïdes muoniques et pour l'atome d'hélium. L'analyse met en évidence les modifications spectrales induites par la non-commutativité, notamment à travers la séparation des coordonnées et l'étude asymptotique des potentiels effectifs.

Nous terminons par une conclusion générale, dans laquelle l'ensemble des résultats obtenus est résumé et discuté.

L'espace non commutatif constitue ainsi un cadre conceptuel fécond pour étendre la physique quantique au-delà de ses limites classiques. Cette thèse entend contribuer à l'approfondissement de l'étude des interactions centrales dans ce contexte, en mettant en lumière les implications physiques de la déformation géométrique sur des systèmes atomiques et moléculaires.

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

Chapitre 1

Introduction à la Mécanique Quantique

1.1 Histoire Brève de la Mécanique Quantique

La mécanique quantique constitue le fondement scientifique de nombreuses branches modernes de la physique et de la chimie contemporaines. Considérée comme l'une des théories les plus importantes du XX^e siècle, elle explique le comportement de la matière et de l'énergie aux échelles atomique et subatomique. Cette théorie a révolutionné notre compréhension de la matière et permis des avancées technologiques majeures dans divers domaines scientifiques.

L'émergence de cette discipline remonte à la découverte par Max Planck en 1900 des lois gouvernant le rayonnement thermique. En proposant un modèle simple pour interpréter les résultats expérimentaux, Planck a mis en évidence la nature quantique du rayonnement. Son approche novatrice, introduisant une discontinuité dans l'émission d'énergie par les corps noirs, a permis de résoudre ce problème physique complexe. Il établit ainsi une équation mathématique décrivant parfaitement la distribution énergétique du rayonnement, introduisant par la même occasion une nouvelle constante fondamentale : la constante de Planck h .

En 1905, Albert Einstein étendit ce concept pour expliquer notamment l'effet photoélectrique, observé expérimentalement par Hertz dès 1887. Contrairement à la théorie électromagnétique de Maxwell qui considérait la lumière comme une onde continue, Einstein démontra son caractère corpusculaire en introduisant la notion de photon, particule d'énergie proportionnelle à sa fréquence. Ces travaux, récompensés par le Prix Nobel en 1921, ont également

conduit à la prédiction de la dualité onde-corpuscule.

Le modèle atomique planétaire proposé par Rutherford en 1911, avec son noyau positif et ses électrons en orbite, présenta cependant des incohérences avec la physique classique. En effet, selon les lois de l'électromagnétisme, les électrons auraient dû perdre progressivement leur énergie et s'effondrer sur le noyau.

Une confirmation décisive de la nature corpusculaire de la lumière fut apportée en 1923 par Arthur Compton. Parallèlement, Louis de Broglie émit l'hypothèse révolutionnaire selon laquelle les particules matérielles pouvaient également présenter un comportement ondulatoire, étendant ainsi le principe de dualité à toute la matière. Cette prédiction fut vérifiée expérimentalement en 1927 par Davison et Germer.

Le développement théorique suivit de près ces découvertes expérimentales, aboutissant à deux formulations mathématiques indépendantes :

- La mécanique matricielle, développée par Heisenberg en 1925, qui décrit la structure atomique à partir des raies spectrales observées
- La mécanique ondulatoire, proposée par Schrödinger en 1926, généralisant l'hypothèse de De Broglie au moyen d'une équation d'onde

Dirac apporta des contributions majeures entre 1927 et 1931, établissant un cadre mathématique unifié pour les vecteurs d'état et intégrant la relativité restreinte à la mécanique quantique. Ses travaux aboutirent à la prédiction de l'antimatière, confirmée expérimentalement par Anderson.

En 1948, l'introduction de la théorie quantique des champs marqua une nouvelle étape, offrant un cadre théorique capable de décrire les quatre interactions fondamentales.

Les travaux de Planck ont également conduit au principe d'incertitude de Heisenberg, qui stipule l'impossibilité fondamentale de déterminer simultanément avec précision la position et la quantité de mouvement d'une particule quantique. Ce principe se traduit mathématiquement par les relations de commutation :

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0 \quad , \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad , \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (1.1)$$

1.2 Équation de Schrödinger

Les développements théoriques du début du XX^e siècle ont montré la nécessité de considérer à la fois les aspects corpusculaires et ondulatoires de la matière et de la lumière pour expliquer les phénomènes quantiques. Ces concepts ont permis notamment d'élucider la structure des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène et sa stabilité. L'équation de Schrödinger, formulée en 1926, constitue depuis lors l'un des piliers de la mécanique quantique moderne.

Contrairement à la mécanique classique où une particule suit une trajectoire bien définie $\mathbf{r}(t)$, la description quantique repose sur une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ dont l'interprétation physique fut établie par Max Born : le carré de son module représente la densité de probabilité de présence de la particule.

1.2.1 Fonction d'Onde d'une Particule Matérielle

La fonction d'onde fournit une description complète d'un système quantique. Elle doit être continue, différentiable et normalisable. Selon l'interprétation probabiliste de Born, la probabilité de trouver une particule dans un élément de volume d^3r s'exprime par :

$$dP = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}. \quad (1.2)$$

La condition de normalisation impose :

$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1. \quad (1.3)$$

1.2.2 Ondes de De Broglie

L'hypothèse de De Broglie établit qu'à l'échelle microscopique, les particules présentent un comportement ondulatoire. Pour une particule libre, la fonction d'onde prend la forme d'une

onde plane :

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}. \quad (1.4)$$

Les relations entre les caractéristiques ondulatoires et corpusculaires s'expriment par :

$$\begin{cases} E = h\nu \\ \mathbf{P} = h/\lambda, \quad \mathbf{k} = \mathbf{P}/\hbar \end{cases}. \quad (1.5)$$

Pour une particule libre, l'énergie cinétique se relie à la fréquence angulaire par :

$$\hbar\omega = E \implies E = \frac{p^2}{2m}. \quad (1.6)$$

1.2.3 Équation de Schrödinger Dépendante du Temps

Schrödinger a établi une équation fondamentale décrivant l'évolution temporelle des systèmes quantiques non relativistes. Pour une particule libre, cette équation s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t). \quad (1.7)$$

En présence d'un potentiel $V(\vec{r})$, l'équation devient :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t). \quad (1.8)$$

L'opérateur Hamiltonien H est défini par :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \quad \text{avec} \quad \Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (1.9)$$

L'équation se réécrit alors sous forme opératorielle :

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (1.10)$$

1.2.4 États Stationnaires (Potentiels Indépendants du Temps)

Pour un potentiel indépendant du temps, on peut rechercher des solutions particulières de la forme :

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \quad (1.11)$$

La partie spatiale $\varphi(\vec{r})$ satisfait alors l'équation aux valeurs propres :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}). \quad (1.12)$$

Cette équation stationnaire permet d'identifier les états quantiques particuliers où la densité de probabilité reste constante dans le temps.

1.2.4.1 Propriétés de l'Équation de Schrödinger

- Linéarité et homogénéité permettant le principe de superposition
- Caractère différentiel du premier ordre par rapport au temps
- Continuité et régularité des solutions physiquement acceptables

1.3 Mouvement dans un Potentiel Central

1.3.1 Introduction

Un **potentiel central** $V(r)$ est un potentiel qui ne dépend que de la distance radiale $r = \|\mathbf{r}\|$ entre une particule et un point fixe (généralement l'origine du repère). Cette propriété confère au système une **symétrie sphérique**, rendant $V(r)$ invariant sous toute rotation autour du centre.

Dans le cas de deux particules de masses m_1 et m_2 en interaction dans un espace isotrope :

- Le mouvement du centre de masse se réduit à une translation uniforme
- Le mouvement relatif est décrit par une particule fictive de **masse réduite** $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

soumise au potentiel $V(r)$

La force centrale associée s'exprime par :

$$\mathbf{F} = -\nabla_r V(r) = -\frac{\partial V(r)}{\partial r} \hat{\mathbf{r}}, \quad (1.13)$$

où $\hat{\mathbf{r}}$ est le vecteur unitaire radial. En mécanique classique, cette symétrie implique la conservation du **moment cinétique orbital** :

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (1.14)$$

Hamiltonien en représentation position

En mécanique quantique, l'Hamiltonien d'une particule dans un potentiel central s'écrit :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r), \quad (1.15)$$

où :

- $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2$ représente l'énergie cinétique
- $V(r)$ est l'énergie potentielle ne dépendant que de r

Exemples de potentiels centraux

1. Particule libre :

$$V(r) = 0. \quad (1.16)$$

2. Puits sphérique :

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{pour } r < a, \\ 0 & \text{pour } r > a. \end{cases} \quad (1.17)$$

3. Oscillateur harmonique :

$$V(r) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2. \quad (1.18)$$

4. Atome hydrogéoïde :

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (1.19)$$

1.3.2 Équation Radiale

En coordonnées sphériques, le Laplacien s'exprime comme [8, 9] :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (1.20)$$

En introduisant l'opérateur L^2 du moment cinétique :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}, \quad (1.21)$$

avec :

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (1.22)$$

L'Hamiltonien devient :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r). \quad (1.23)$$

L'équation aux valeurs propres correspondante est :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi). \quad (1.24)$$

Les opérateurs H , L^2 et L_z commutent mutuellement, formant un ensemble complet d'observables compatibles. Les solutions se séparent en harmoniques sphériques et partie radiale :

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad (1.25)$$

avec :

$$L^2 Y_{l,m}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad (1.26)$$

$$L_z Y_{l,m}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \phi). \quad (1.27)$$

La condition de normalisation impose :

$$\int_0^\infty |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr = 1. \quad (1.28)$$

L'équation radiale pour $R_{n,l}(r)$ devient :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] R_{n,l}(r) = E_{n,l} R_{n,l}(r). \quad (1.29)$$

En posant $R_{n,l}(r) = \frac{U_{n,l}(r)}{r}$, on obtient [10] :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 U_{n,l}(r)}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] U_{n,l}(r) = E_{n,l} U_{n,l}(r), \quad (1.30)$$

où le potentiel effectif est :

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}. \quad (1.31)$$

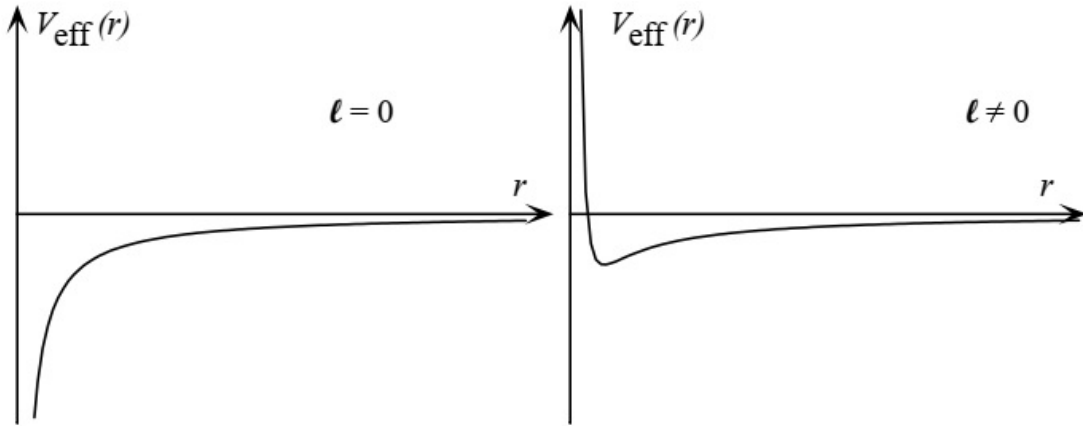


FIGURE 1.1 – Potentiel effectif intervenant dans l'équation de Schrödinger uni dimensionnelle pour la fonction d'onde radiale réduite $u(r)$. Pour $l = 0$ (à gauche), le mouvement se passe dans le potentiel « nu » $V(r)$; pour $l \neq 0$ (à droite), le potentiel effectif est la superposition de $V(r)$ et de la barrière centrifuge $l(l+1)\hbar^2/(2\mu_e r^2)$. Cette figure est dessinée pour un potentiel coulombien $V(r) \propto -1/r$. [11].

1.3.3 Propriétés des Solutions et Conditions aux Limites

Les solutions physiquement acceptables doivent être de carré sommable, deux fois différentiables et définies sur \mathbb{R}^3 .

Comportement à l'origine ($r \rightarrow 0$)

Pour $r \rightarrow 0$, le potentiel effectif domine :

$$V_{\text{eff}}^l(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{l(l+1)}{r^2} + O\left(\frac{1}{r}\right). \quad (1.32)$$

En recherchant des solutions sous forme $U_{n,l}(r) \sim r^\alpha$, on trouve deux comportements :

$$\alpha(\alpha - 1) = l(l + 1) \Rightarrow \begin{cases} \alpha_1 = l + 1 \\ \alpha_2 = -l \quad (\text{exclu}) \end{cases} . \quad (1.33)$$

Ainsi :

$$U_{n,l}(r) \approx r^{l+1} \quad \text{et} \quad R_{n,l}(r) \approx r^l. \quad (1.34)$$

Comportement asymptotique ($r \rightarrow \infty$)

Pour $r \rightarrow \infty$, l'équation se simplifie en :

$$\frac{d^2 U_{n,l}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E_{n,l} U_{n,l}(r) = 0. \quad (1.35)$$

Les solutions dépendent du signe de l'énergie :

– Pour $E > 0$ (états non liés) :

$$U_{n,l}(r) = A e^{ikr} + B e^{-ikr} \quad (k = \sqrt{2\mu E/\hbar^2}). \quad (1.36)$$

– Pour $E < 0$ (états liés) :

$$U_{n,l}(r) = C e^{-\kappa r} \quad (\kappa = \sqrt{2\mu|E|/\hbar^2}), \quad (1.37)$$

avec $\lim_{r \rightarrow \infty} U_{n,l}(r) = 0$, conduisant à la quantification des niveaux d'énergie.

1.4 Atome d'Hydrogène

L'étude de l'atome d'hydrogène [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17] occupe une place centrale en physique quantique. Ce système simple permet de valider les théories quantiques tout en servant de référence pour des systèmes plus complexes.

1.4.1 Description du Système

L'atome d'hydrogène consiste en :

- Un proton de masse $m_p = 1,7 \times 10^{-27}$ kg et charge $+e$
- Un électron de masse $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg et charge $-e$

L'interaction principale est le potentiel coulombien :

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}, \quad (1.38)$$

où $e^2 = q^2/(4\pi\epsilon_0)$ et r est la distance nucléon-électron.

1.4.2 Équation Radiale

L'équation radiale pour la fonction d'onde réduite $U_{n,l}(r)$ s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 U_{n,l}(r)}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] U_{n,l}(r) = E U_{n,l}(r), \quad (1.39)$$

avec le potentiel effectif :

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}. \quad (1.40)$$

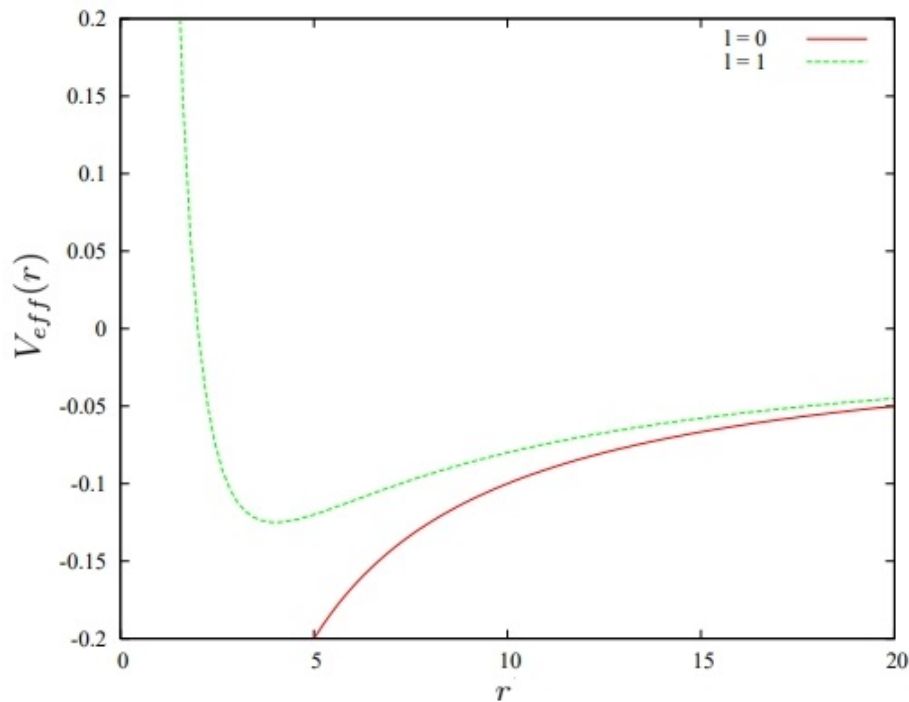


FIGURE 1.2 – Allure de $V_{\text{eff}}(r)$ en fonction de r pour $l = 0, 1$

1.4.3 Unités Naturelles

Introduisons les unités atomiques :

- Rayon de Bohr : $a_0 = \hbar^2/(\mu e^2) \approx 0.529 \text{ \AA}$
- Énergie de Rydberg : $R_\infty = e^2/(2a_0) \approx 13.6 \text{ eV}$

Définissons les variables adimensionnées :

$$\rho = \frac{r}{a_0}, \quad \lambda_{n,l} = \sqrt{-E_{n,l}/R_\infty}. \quad (1.41)$$

L'équation radiale devient :

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda_{n,l}^2 \right] U_{n,l}(\rho) = 0. \quad (1.42)$$

1.4.4 Résolution de l'Équation Radiale

1.4.4.1 Solution Asymptotique

Pour $\rho \rightarrow \infty$, l'équation se simplifie en :

$$\frac{d^2 U_{n,l}}{d\rho^2} - \lambda_{n,l}^2 U_{n,l} = 0, \quad (1.43)$$

dont la solution physiquement acceptable est :

$$U_{n,l}(\rho) \sim e^{-\lambda_{n,l}\rho}. \quad (1.44)$$

1.4.4.2 Solution Générale

Cherchons une solution de la forme :

$$U_{n,l}(\rho) = e^{-\lambda_{n,l}\rho} \rho^{l+1} y_{n,l}(\rho), \quad (1.45)$$

avec $y_{n,l}(\rho)$ développable en série :

$$y_{n,l}(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} c_q \rho^q. \quad (1.46)$$

En substituant dans (1.42), on obtient la relation de récurrence :

$$c_q = c_{q-1} \frac{2(\lambda_{n,l}(q+l) - 1)}{q(q+2l+1)}. \quad (1.47)$$

1.4.5 Quantification des Niveaux d'Énergie

La série doit se terminer pour éviter une divergence exponentielle. Cela impose :

$$\lambda_{n,l} = \frac{1}{n+l}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.48)$$

Les énergies possibles sont données par [12, 11, 17]

$$E_{n,l} = \frac{-E_1}{(n+l)^2} ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.49)$$

Nous pouvons constater que l'énergie, E , ne dépend pas de n et de l séparément, mais de la somme des deux. Par conséquent, nous pouvons poser $n' = n + l$, ce qui donne pour les différents niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène

$$E_{n'} = -\frac{R_\infty}{n'^2} ; \quad n' = 1, 2, 3, \dots \quad (1.50)$$

1.4.6 Fonctions d'Onde Radiales

Les solutions normalisées s'écrivent :

$$R_{n,l}(r) = \mathcal{N}_{n,l} e^{-r/(na_0)} \left(\frac{r}{a_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right), \quad (1.51)$$

où L_k^α sont les polynômes de Laguerre généralisés et $\mathcal{N}_{n,l}$ le facteur de normalisation.

Exemples pour les premiers états :

$$R_{1,0}(r) = 2a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}, \quad (1.52)$$

$$R_{2,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} a_0^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/(2a_0)}, \quad (1.53)$$

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} a_0^{-3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/(2a_0)}. \quad (1.54)$$

1.4.7 Niveaux d'Énergie et Fonctions d'Onde

D'après l'éq. (1.50) et pour n fixé, il existe une infinité de valeurs possibles de l'énergie E_n correspondant à $l : l = 1, 2, 3, \dots, n - 1$. (il est habituel de remplacer le nombre quantique n' par n si nécessaire où $n' \equiv n$. n s'appelle le nombre quantique principal). De plus, pour chaque valeur l , elle est dégénérée au moins de $2l + 1$ valeurs possibles de m où $m = -l, -l + 1, \dots, l$

Il est généralement admis que les niveaux d'énergie sont représentés comme une fonction de l , où l'énergie ne dépend que de n , et que la classification par (n, l, m) est complète, bien que il y'a des dégénérescences qui persistent . Le nombre quantique principal n définit ce que nous appelons une « couche électronique ». Chaque couche est constituée de n sous-couches, chacune correspondant à une valeur de l et possédant $(2l + 1)$ états différents associés à $2l + 1$ valeurs possibles de m pour une valeur de l fixée. Dans la figure 1.3 sont représentés les niveaux d'énergie E_n de l'atome d'hydrogène. Chaque ligne horizontale représente un niveau d'énergie. les chiffres inscrit à sa gauche correspondent à la valeur de n . La colonne indique une valeur spécifique de l et le coté représente l'énergie. Il est à observé que les niveaux sont dégénérés, sauf dans le cas où $n = 1$. Il est possible de prendre toutes les valeurs de l , comprises entre $l = 0$ et $l = n - 1$ pour une valeur donnée de n .

Nous pouvons résumer nos résultats obtenus dans cette section comme suit

- Chacun des états liés du problème coulombien est identifié par trois entiers, ou nombres quantiques, dans l'équation de Schrödinger (1.39)

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad l = 0, 1, \dots, n - 1 \quad m = -l, \dots, l. \quad (1.55)$$

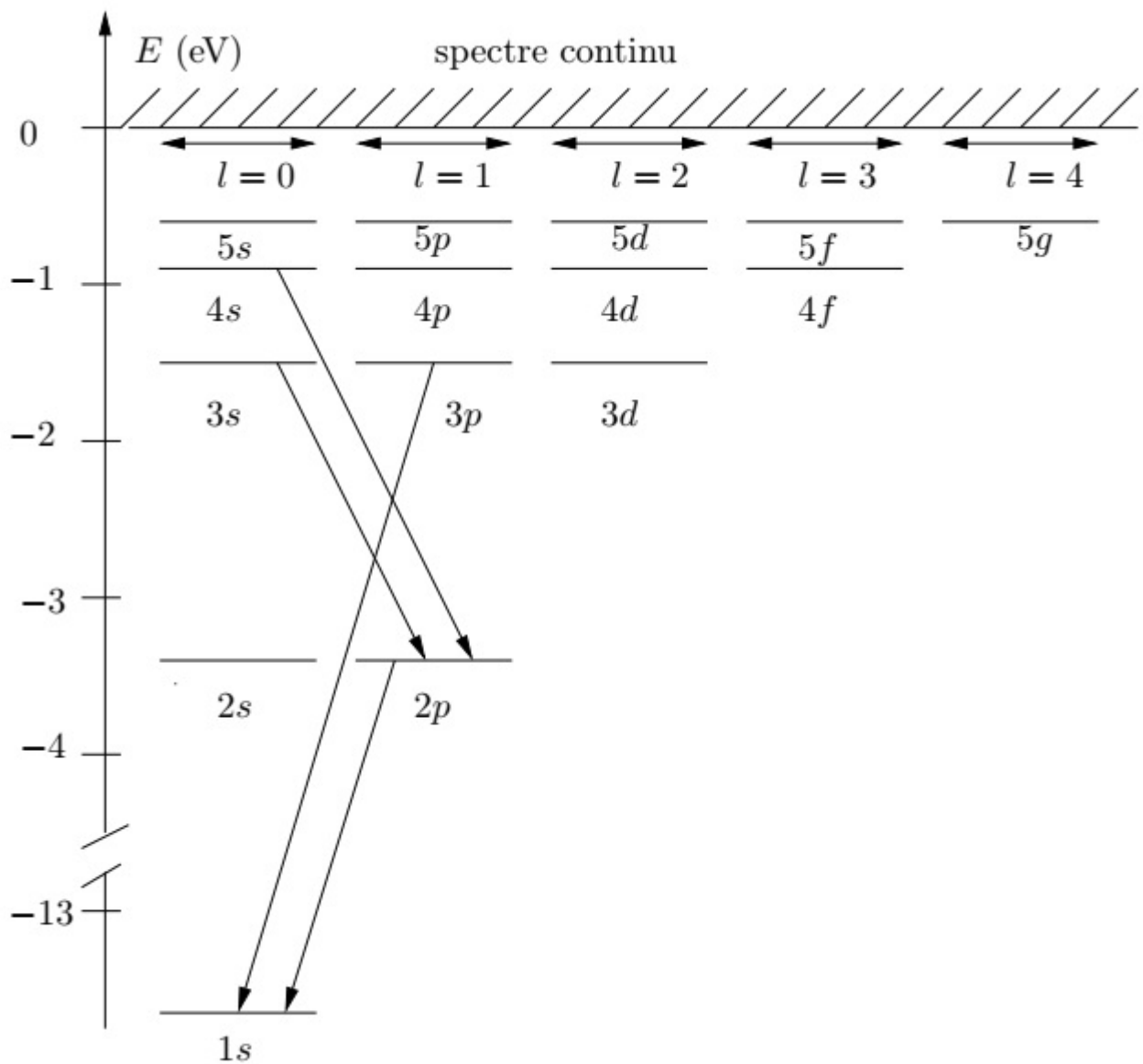


FIGURE 1.3 – Spectre de l’atome d’hydrogène et exemples de transitions possibles [13]).

– Plusieurs valeurs du moment cinétique peuvent être obtenues à chaque niveau d’énergie.

La totalité de la dégénérescence (exprimée en l et m) d’un niveau donné de n est

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2 . \quad (1.56)$$

– La fonction d’onde, qui correspond aux nombres quantiques n, l, m , est unique (à une

phase près) et s'écrit comme suit

$$\psi_{n,l,m}(r) = Y_{l,m}(\theta, \varphi) e^{-r/(na_0)} \left(\frac{r}{a_0} \right)^l \left[c_0 + c_1 \frac{r}{a_0} + \cdots + c_{n-l-1} \left(\frac{r}{a_0} \right)^{n-l-1} \right]. \quad (1.57)$$

1.5 Méthodes d'Approximations

En physique classique, il est peu fréquent de pouvoir résoudre de manière analytique les équations de Newton ou de Maxwell avec des conditions initiales données. La plupart du temps, il est nécessaire de recourir à des méthodes approximatives, telles que l'intégration numérique, la méthode des perturbations, ou d'autres techniques adaptées [11, 13, 18, 19].

De manière similaire, en mécanique quantique, l'étude des systèmes conservatifs repose sur la résolution de l'équation aux valeurs propres de l'opérateur Hamiltonien. Cependant, seuls quelques problèmes, comme ceux de la particule libre ou de l'atome d'hydrogène, admettent une solution exacte à l'équation de Schrödinger. Dans la majorité des cas, il est nécessaire d'adopter des approches approximatives. Parmi celles-ci, la théorie des perturbations et les méthodes variationnelles jouent un rôle central. La théorie des perturbations s'applique principalement lorsque le problème à étudier est un faible écart par rapport à un système idéal bien compris. En revanche, les méthodes variationnelles se révèlent particulièrement efficaces lorsque l'on dispose d'une estimation qualitative de la forme de la fonction d'onde recherchée.

1.5.1 Théorie des Perturbations Stationnaires

La théorie des perturbations stationnaires est fréquemment utilisée en physique quantique, car elle correspond bien à l'approche méthodique des physiciens. En général, lorsqu'ils analysent un phénomène ou un système physique, ils commencent par identifier les effets dominants qui définissent les caractéristiques principales du système. Une fois cette structure globale établie, ils approfondissent l'analyse en prenant en compte les effets secondaires, initialement négligés dans une première approximation. C'est précisément pour traiter ces effets secondaires que la théorie des perturbations se révèle particulièrement utile.

Dans cette section, nous allons exposer la méthode des perturbations indépendante du temps, on considère un Hamiltonien indépendant du temps que l'on sépare en deux parties [13, 14, 15, 11, 18]

$$H = H_0 + W , \quad (1.58)$$

H_0 est l'Hamiltonien d'un système que l'on peut résoudre exactement (à titre d'exemple l'atome d'Hydrogène, l'oscillateur harmonique...), où les états propres et valeurs propres de H_0 sont connus et W est une perturbation dont les éléments de matrices sont petits ou faibles par rapport à ceux de H_0 . Lorsque nous disons que W est petit devant H_0 , W est une perturbation dont les éléments de matrices sont petits ou faibles par rapport à ceux de H_0 . Pour cette raison, nous allons supposer que W est proportionnelle à un paramètre réel λ , sans dimension et petit devant 1, tel que $H = H_0$ si $\lambda = 0$ et $H = H_0 + W$ si $\lambda = 1$

$$W = \lambda \widehat{W} \implies H = H_0 + \lambda \widehat{W} \quad \text{où } \lambda \ll 1 \quad (1.59)$$

\widehat{W} étant un opérateur dont les éléments de matrice sont comparables à ceux de H_0 . La théorie des perturbations implique donc de transformer les valeurs propres et les états propres de H en puissances de λ , tout en prenant en compte un nombre limité de termes dans ces développements. Les états propres et les valeurs propres de l'Hamiltonien non perturbé H_0 sont supposés connus. En outre, nous supposerons que les énergies non perturbées constituent un spectre discret, Les états propres associés seront : $|\psi_n^i\rangle$ L'indice supplémentaire i offre la possibilité de distinguer, en cas de dégénération d'une valeur propre E_n^0 , Ainsi, nous disposons de

$$H_0 |\psi_n^i\rangle = E_n^0 |\psi_n^i\rangle , \quad (1.60)$$

où l'ensemble des vecteurs $|\psi_n^i\rangle$ forme une base orthonormée de l'espace des états.

1.5.2 Développement des Etats et des Energies Propres

Nous supposerons que les niveaux d'énergie E de H varient analytiquement en fonction de λ . Lorsque la valeur de λ est faible, ces niveaux et les états propres correspondants sont donc similaires à ceux de l'Hamiltonien non perturbé H_0 .

Selon l'équation (1.59), l'Hamiltonien du système dépend du paramètre λ . Les valeurs propres et les vecteurs propres de $H(\lambda)$ sont donc déterminés en utilisant une expansion en série de puissances de λ . La méthode des perturbations consiste à développer E et H en puissances de λ

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots \quad (1.61)$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots, \quad (1.62)$$

et à déterminer les coefficients successifs de ces développements, prenons donc en compte ces développements dans l'équation aux valeurs propres (1.59) pour cela

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda \widehat{W}) (|\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots) &= (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots) \\ &\times (|\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots) \end{aligned} \quad (1.63)$$

Nous imposons que cette équation soit vérifiée pour tout λ suffisamment petit. Pour que l'égalité soit satisfaite, nous regroupons les termes en fonction des puissances successives de λ , ce qui donne

– pour les termes d'ordre 0 en λ

$$H_0 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^0\rangle, \quad (1.64)$$

– pour les termes d'ordre 1

$$H_0 |\psi_n^1\rangle + \widehat{W} |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^1\rangle + E_n^1 |\psi_n^0\rangle, \quad (1.65)$$

– pour les termes d'ordre 2

$$H_0 |\psi_n^2\rangle + \widehat{W} |\psi_n^1\rangle = E_n^0 |\psi_n^2\rangle + E_n^1 |\psi_n^1\rangle + E_n^2 |\psi_n^0\rangle, \quad (1.66)$$

– pour les termes généraux d'ordre q

$$H_0 |\psi_n^q\rangle + \widehat{W} |\psi_n^{q-1}\rangle = E_n^0 |\psi_n^q\rangle + E_n^1 |\psi_n^{q-1}\rangle + E_n^2 |\psi_n^{q-2}\rangle + \dots + E_n^q |\psi_n^0\rangle. \quad (1.67)$$

Par ailleurs, l'état $|\psi_n^0\rangle$ doit être normé, ce qui implique

$$\langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = 1, \quad (1.68)$$

$$\langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle + \langle \psi_n^1 | \psi_n^0 \rangle = 0, \quad (1.69)$$

$$\langle \psi_n^0 | \psi_n^2 \rangle + \langle \psi_n^1 | \psi_n^1 \rangle + \langle \psi_n^2 | \psi_n^0 \rangle = 0, \quad (1.70)$$

L'équation (1.64) impose que $|\psi_n^0\rangle$ soit un état propre de H_0 avec l'énergie E_0^n . Il nous faut maintenant distinguer les cas où E_0^n est dégénérées ou non.

1.5.3 Perturbation d' Un Niveau Non Dégénéré

Considérons un niveau d' énergie non dégénère de H_0 , d' énergie E_n^0 et d' état propre $|\psi_n^0\rangle$ [11, 18].

1.5.3.1 Correction de l' Energie au 1^{er} Ordre

Multiplions à gauche les deux membres de cette equation (1.65) par le bra $\langle \psi_n^0 |$ et tenons compte de l'équation (1.64) c-t-a- $\langle \psi_n^0 | H_0 = E_n^0 \langle \psi_n^0 |$ nous obtenons

$$\langle \psi_n^0 | H_0 | \psi_n^1 \rangle + \langle \psi_n^0 | \widehat{W} | \psi_n^0 \rangle = \langle \psi_n^0 | E_n^0 | \psi_n^1 \rangle + \langle \psi_n^0 | E_n^1 | \psi_n^0 \rangle \quad (1.71)$$

$$\implies E_n^1 = \langle \psi_n^0 | \widehat{W} | \psi_n^0 \rangle, \quad (1.72)$$

cela nous donne la première correction de l'énergie en fonction de l'état non perturbé $|\psi_n^0\rangle$ et de la perturbation \widehat{W} .

En tenant compte de l'équation (1.62), dans le cas d'un niveau E_0^n non dégénéré, la valeur propre E_n de H qui correspond à E_0^n s'écrit donc, au premier ordre par rapport à la perturbation $W = \lambda \widehat{W}$

$$E_n = E_0^n + \langle \psi_n^0 | W | \psi_n^0 \rangle + O(\lambda)^2 \quad (1.73)$$

1.5.3.2 Correction de l'Etat au 1^{er} Ordre

$$\langle \psi_m^i | \widehat{W} | \psi_n^0 \rangle + \langle \psi_m^i | H_0 | \psi_n^1 \rangle = \langle \psi_m^i | E_n^1 | \psi_n^0 \rangle + \langle \psi_m^i | E_n^0 | \psi_n^1 \rangle, \quad (1.74)$$

A partir de ce qui précède, on peut déduire que

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_m^i | H_0 &= \langle \psi_m^i | E_m^0 \\
 \langle \psi_m^i | E_n^1 | \psi_n^0 \rangle &= 0 \\
 \implies \langle \psi_m^i | \psi_n^1 \rangle &= \frac{\langle \psi_m^i | \widehat{W} | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}
 \end{aligned} \tag{1.75}$$

On a donc obtenu les projections de $|\psi_n^1\rangle$ sur la base $\{|\psi_m^i\rangle\}$, pour tout $m \neq n$. On peut alors écrire [20] :

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \sum_{i=1}^{d_m} \langle \psi_m^i | \psi_n^1 \rangle |\psi_m^i\rangle = \sum_{m \neq n} \sum_{i=1}^{d_m} \frac{\langle \psi_m^i | \widehat{W} | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |\psi_m^i\rangle \tag{1.76}$$

En utilisant les équations (1.59) et (1.65), on obtient la correction d'ordre 1 aux états

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \lambda \sum_{m \neq n} \sum_{i=1}^{d_m} \frac{\langle \psi_m^i | \widehat{W} | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |\psi_m^i\rangle \tag{1.77}$$

Le développement (1.77) conduit à l'approximation

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \lambda \sum_{m \neq n} \sum_{i=1}^{d_m} \frac{\langle \psi_m^i | W | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |\psi_m^i\rangle + O(\lambda)^2 \tag{1.78}$$

1.5.3.3 Correction de l'Energie au 2^{ème} Ordre

De la même façon on peut obtenir la correction à l'ordre 2 aux énergies en projetant l'équation (1.66) sur les bra $\langle \psi_n^0 |$, on obtient

$$\begin{aligned}
 E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2, \\
 &= E_n^0 + \langle \psi_n^0 | W | \psi_n^0 \rangle + \sum_{m \neq n} \sum_{i=1}^{d_m} \frac{|\langle \psi_m^i | W | \psi_n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}
 \end{aligned}$$

1.5.4 Méthode des Variations

Comme nous l'avons observé, le nombre de systèmes quantiques pour lesquels l'Hamiltonien peut être résolu exactement est très limité, ce qui rend les méthodes d'approximation indispensables en mécanique quantique. Parmi celles-ci, la théorie des perturbations, intro-

duite dans la section précédente, offre un cadre pour traiter les systèmes proches d'une solution exacte. Dans cette section, nous présentons une autre approche puissante : le principe variationnel. Ce principe repose sur le choix d'une fonction d'onde test, permettant d'obtenir une limite supérieure de l'énergie de l'état fondamental. Grâce à un choix approprié de cette fonction d'onde test et à une optimisation de ses paramètres ajustables, il est possible d'obtenir une estimation très correcte de l'énergie de l'état fondamental et des fonctions d'onde de systèmes relativement complexes sans avoir à résoudre le problème de manière exacte.

Considérons un hamiltonien H indépendant du temps pour lequel l'équation de Schrödinger est de la forme

$$\begin{aligned} H |\varphi_0\rangle &= E_0 |\varphi_0\rangle \\ H |\varphi_1\rangle &= E_1 |\varphi_1\rangle \\ &\vdots \\ H |\varphi_n\rangle &= E_n |\varphi_n\rangle \end{aligned} \tag{1.79}$$

où $|\varphi_n\rangle$ est l'ensemble complet de kets propres (normalisés) associés aux énergies $\{E_n\}$. Soit un vecteur d'état arbitraire $|\psi\rangle$, ce dernier admet la décomposition où $|\varphi_n\rangle$ est l'ensemble complet de kets propres (normalisés) associés aux énergies $\{E_n\}$. Soit un vecteur d'état arbitraire $|\psi\rangle$, ce dernier admet la décomposition

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |\varphi_n\rangle, \tag{1.80}$$

et permet d'exprimer la valeur moyenne de l'énergie $\langle H \rangle$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_n |a_n|^2 E_n. \tag{1.81}$$

Le principe variationnel est basé sur le fait que cette valeur moyenne donne une limite supérieure à l'énergie E_0 , où E_0 représente la plus petite énergie du spectre, c'est-à-dire l'énergie de l'état fondamental, alors pour tout vecteur d'état $|\psi\rangle$, on a nécessairement

$$\langle \psi | H | \psi \rangle \geq E_0 \sum_n |a_n|^2 \geq E_0. \tag{1.82}$$

Comme nous n'avons pas supposé que $|\psi\rangle$ était normalisé, la présence de $\langle\psi|\psi\rangle$ au dénominateur est nécessaire, donc cette inégalité s'écrit alors sous la forme

$$\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0 \quad (1.83)$$

L'équation (1.83) indique que l'expression $\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$ fournit une limite supérieure à l'énergie de l'état fondamental E_0 . Mais comment l'utiliser pour estimer E_0 pour un hamiltonien H ? Une première approche consiste à substituer différentes fonctions d'onde $|\psi\rangle$ dans le membre de gauche de l'équation (1.83) et à sélectionner celle qui donne la valeur la plus basse. Comme cette valeur représente une borne supérieure de E_0 , la plus petite réponse obtenue fournira la meilleure approximation de E_0 . Cependant, il existe une méthode permettant d'échantillonner un nombre infini de fonctions d'onde d'essai : en définissant $|\psi\rangle$ comme une fonction d'un paramètre continu α , que l'on peut faire varier, on obtient alors que $\frac{\langle\psi(\alpha)|H|\psi(\alpha)\rangle}{\langle\psi(\alpha)|\psi(\alpha)\rangle}$ devient une fonction continue de α , toujours supérieure à E_0 . En ajustant α pour minimiser cette expression, on obtient ainsi la meilleure estimation de E_0 .

1.6 Effet Zeeman

L'effet Zeeman consiste à diviser les niveaux d'énergie atomiques, et donc des lignes spectrales, lorsque les atomes sont exposés à un champ magnétique. Ce phénomène confirme la quantification du moment angulaire et clarifie le rôle du nombre quantique magnétique, m_l . Initialement suggéré par Michael Faraday au XIX^e siècle, cet effet n'a pu être observé qu'avec l'expérience de Peter Zeeman en 1896, qui utilisait un équipement spectroscopique sophistiqué. La théorie classique prédit un « effet Zeeman normal », où chaque ligne spectrale se divise en trois composantes (une à la fréquence d'origine et deux décalées symétriquement). Cependant, dans la plupart des cas, les divisions sont plus complexes et sont appelées « effet Zeeman anormal ». L'explication complète quantique, incluant le spin de l'électron (introduit par Goudsmit et Uhlenbeck en 1925), permet de comprendre ces déviations. L'effet Zeeman normal peut être expliqué par le mouvement orbital des électrons seulement, mais il est essentiel de comprendre l'influence d'un champ magnétique sur les électrons en orbite pour cette

interprétation.

Pour mieux comprendre l'origine de l'effet Zeeman, prenons l'Hamiltonien d'une particule de masse m et de charge électrique q qui est soumise à un champ magnétique $\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$

$$H_B = \frac{(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}))^2}{2m} + V(\vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) - \frac{q}{2m} (\vec{p}\vec{A} + \vec{A}\vec{p}) + \frac{q^2}{2m} \vec{A}^2 \quad (1.84)$$

Nous plaçons un atome, préparé dans un état d'énergie E et de moment angulaire j , dans un champ magnétique B uniforme, dans une jauge symétrique, le potentiel vecteur s'exprime comme $\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\vec{B}\vec{r}$. Supposons que le champ magnétique soit orienté suivant l'axe z . L'énergie potentielle d'un dipôle magnétique $\vec{\mu}$ dans un champ magnétique \vec{B} est simplement $V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, donc la perturbation produite par le champ magnétique est

$$H_1 = -\mu B. \quad (1.85)$$

L'interaction d'un champ magnétique \vec{B} avec les moments magnétiques orbital et de spin de l'électron, notés respectivement μ_l et μ_s , génère deux termes d'énergie distincts. Ces termes sont

– $-\vec{\mu}_l \cdot \vec{B}$ qui correspond à l'énergie due au moment magnétique orbital de l'électron, où $\vec{\mu}_l = e\vec{L}/(2m_e c)$

– $-\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}$ qui correspond à l'énergie due au moment magnétique de spin de l'électron, où $\vec{\mu}_s = e\vec{S}/(m_e c)$.

La somme de ces deux contributions est appelée énergie de Zeeman.

$$H_Z = \frac{e}{2m_e c} \vec{L} \cdot \vec{B} + \frac{e}{m_e c} \vec{S} \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_e c} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B}. \quad (1.86)$$

Cette énergie totale traduit l'effet global du champ magnétique externe sur l'électron, en prenant en compte à la fois son mouvement orbital autour du noyau et son spin intrinsèque. Dans le cadre de la mécanique quantique, cette énergie est cruciale pour comprendre le découplage des niveaux d'énergie des électrons en présence d'un champ magnétique, qui se ma-

nifeste par le splitting des lignes spectrales observées dans l'effet Zeeman.

Lorsque un atome d'hydrogène est placé dans un champ magnétique externe, son hamiltonien est donné par

$$H = H_0 + H_{FS} + H_Z . \quad (1.87)$$

Tout comme pour H_{FS} , la correction due à H_Z de (1.87) devrait être faible par rapport à H_0 . Par conséquent, elle peut être traitée de manière perturbative. Cela permet de simplifier l'analyse du système en prenant en compte uniquement les effets principaux, tout en négligeant les corrections de moindre importance. Nous pouvons maintenant examiner séparément les cas où le champ magnétique \vec{B} est soit fort, soit faible.

Lorsque le champ est fort, le terme $\frac{e}{2m_e c} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B}$ associé à l'interaction magnétique sera beaucoup plus grand que les contributions provenant de la structure fine de l'atome. Dans le cas où HF peut être négligé, l'hamiltonien total se simplifie et l'on peut réduire (1.87) en prenant en compte uniquement les contributions significatives, ce qui facilite le calcul des énergies corrigées.

$$H = H_0 + H_Z = H_0 + \frac{e}{2m_e c} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} . \quad (1.88)$$

Afin de trouver le décalage d'énergie dû à la perturbation magnétique $E_{n,l,j,m_j}^{(1)}$, dans l'approximation du premier ordre, nous devons utiliser les états propres de $H_0 + H_{FS}$ pour obtenir la valeur moyenne de H_Z

$$E_{n,l,j,m_j}^{(1)} = \langle n, l, j, m_j | \frac{e}{2m_e c} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} | n, l, j, m_j \rangle , \quad (1.89)$$

On définit $\omega_L = \frac{e}{2m_e c} B$, où ω_L est appelée « pulsation de Larmor ». L'équation devient donc

$$E_{n,l,j,m_j}^{(1)} = \langle n, l, j, m_j | \omega_L (L_z + 2S_z) | n, l, j, m_j \rangle , \quad (1.90)$$

puisque H_Z ne concerne que les variables d'orbite et de spin. En utilisant l'égalité $J_z = L_z + S_z$,

la relation (1.90) s'écrit

$$E_{n,l,j,m_j}^{(1)} = \langle n, l, j, m_j | \omega_L J_z | n, l, j, m_j \rangle + \langle n, l, j, m_j | \omega_L S_z | n, l, j, m_j \rangle, \quad (1.91)$$

Le premier terme de l'équation (1.91) s'écrit sous la forme

$$\langle n, l, j, m_j | \omega_L J_z | n, l, j, m_j \rangle = \omega_L \hbar m_j. \quad (1.92)$$

Comme pour le second terme de l'équation (1.91) de [21, 22], nous avons

$$\langle n, l, j, m_j | \omega_L S_z | n, l, j, m_j \rangle = \omega_L \hbar m_j (g_L - 1), \quad (1.93)$$

où le coefficient g_L , appelé « facteur de Landé », a pour valeur

$$g_L = 1 + \frac{j(j+1)l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}. \quad (1.94)$$

L'énergie de perturbation $E_{n,l,j,m_j}^{(1)}$, compte tenu de (1.92) et (1.93) devient

$$E_{n,l,j,m_j}^{(1)} = \omega_L \hbar m_j g_L = \Lambda g_L m_j \quad (1.95)$$

où Λ est appelé le paramètre de Lorentz.

On observe que, pour une valeur donnée de j et l , l'énergie de perturbation dépend de m_j ; ainsi, la dégénérescence du niveau n est pas complètement levée. Pour un ensemble de valeurs des nombres quantiques n, l, j, m_j , il existe un niveau d'énergie E_{n,l,j,m_j} auquel est associé un seul vecteur d'état $|n, l, j, m_j\rangle$. Dans le cas de l'atome d'hydrogène, nous avons :

$$j = \frac{1}{2} \text{ si } l = 0 ; \quad j = l \pm \frac{1}{2} \text{ si } l \neq 0 \quad (1.96)$$

Dans la Figure 1.4, nous représentons les modifications dues à l'interaction spin-orbite et à l'effet Zeeman sur les niveaux s et p .

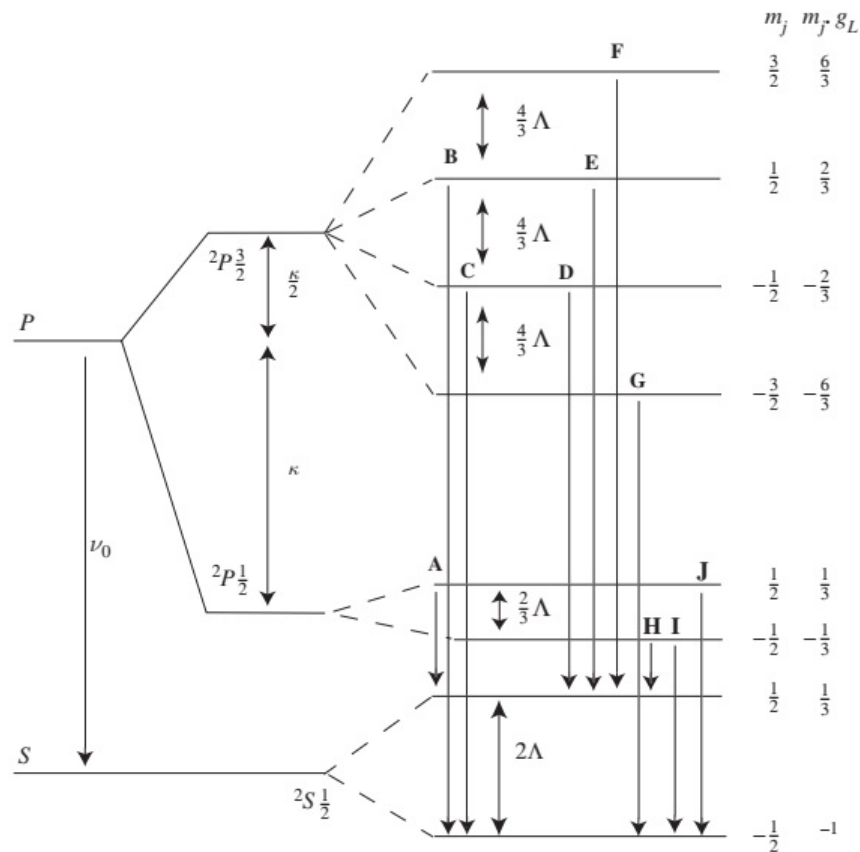


FIGURE 1.4 – Modifications des niveaux d'énergie s et p dues à l'effet Zeeman. En partant de la gauche, la correction spin-orbite affecte d'abord les niveaux non perturbés, ce qui laisse le niveau s inchangé. Ensuite, les trois niveaux résultants sont à nouveau divisés en raison de l'interaction magnétique avec le champ externe B . Cette division est régie par l'intensité du champ magnétique (représentée par Λ), le facteur g_L de Landé (qui dépend de j, s, j) et la valeur propre m_j de J_z . Les dix transitions possibles entre les niveaux sont désignées par les lettres majuscules **A, B, C, ..., J**. [21].

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

Chapitre 2

Espace Non-Commutatif

2.1 Introduction

La géométrie non commutative est un domaine de la géométrie moderne qui s'inspire directement des concepts de la physique quantique. Elle généralise la géométrie classique en permettant l'étude d'espaces dont la structure est trop complexe ou « étrange » pour être décrite par les outils traditionnels. Son idée fondamentale consiste à transposer la notion d'espace géométrique, habituellement décrite par des algèbres commutatives, vers des structures algébriques non commutatives.

Dans la géométrie classique, les coordonnées spatiales ou temporelles satisfont des relations de commutativité, ce qui signifie que l'ordre des opérations n'affecte pas le résultat. Cette propriété est essentielle à notre compréhension de l'espace et du temps. En revanche, en géométrie non commutative, l'algèbre associée à un espace-temps ne respecte pas cette règle : l'ordre des opérations sur les coordonnées devient significatif. Bien que contre-intuitive, cette approche permet d'explorer de nouveaux types d'espaces géométriques inaccessibles aux méthodes classiques.

Les premières idées d'un espace-temps non commutatif émergent en physique théorique, notamment dans le cadre de la théorie quantique des champs. Le physicien Théodore Snyder [3] fut un pionnier en 1947, proposant une structure quantifiée de l'espace-temps pour résoudre les problèmes de divergences ultraviolettes tout en préservant la covariance de Lo-

rentz. Bien que ses travaux aient suscité un intérêt initial, c'est la théorie de la renormalisation qui finit par dominer l'attention des chercheurs.

La formalisation mathématique de la géométrie non commutative s'est véritablement développée dans les années 1980 grâce aux travaux d'Alain Connes [1, 23, 24]. Ce cadre théorique est devenu un outil puissant en mathématiques et en physique, permettant d'aborder des questions fondamentales comme la quantification de l'espace-temps et l'unification de la mécanique quantique avec la relativité générale.

La caractéristique principale de la géométrie non commutative [25, 26, 27] réside dans la non-commutativité des coordonnées de l'espace-temps, exprimée par des relations de commutation quantique. Pour deux coordonnées \hat{x}_i et \hat{x}_j , et deux impulsions \hat{p}_i et \hat{p}_j , on a [5, 28] :

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] \neq 0 \quad \text{et} \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] \neq 0. \quad (2.1)$$

2.1.1 Objectifs et Applications

L'objectif principal de la géométrie non commutative est de fournir une structure algébrique suffisamment générale pour décrire des espaces inaccessibles à la géométrie classique. Cela inclut notamment les espaces à structure quantique intrinsèque, pertinents pour les théories de gravité quantique et de cosmologie quantique. Cette approche pourrait permettre une description plus complète des phénomènes physiques aux échelles où gravité et mécanique quantique coexistent, comme près du Big Bang ou des trous noirs.

De plus, la géométrie non commutative offre un cadre théorique pour étudier la physique des particules, permettant de formuler les interactions fondamentales tout en évitant les divergences infinies des théories classiques.

2.2 Algèbre d'Espace-Temps Non-Commutatif

Les relations de commutation non triviales introduisent une structure profondément différente dans les interactions spatiales. En mécanique quantique standard, les relations de Hei-

senberg pour les positions \hat{x}_i et les impulsions \hat{p}_j s'écrivent :

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \quad (2.2)$$

Dans un espace-temps non commutatif, cette structure est enrichie par les relations suivantes [29, 30, 31] :

$$\begin{cases} [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = i\theta_{ij}, \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = i\sigma_{ij}, \\ [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \end{cases} \quad (2.3)$$

où θ_{ij} et σ_{ij} sont des tenseurs antisymétriques caractérisant respectivement la non-commutativité des coordonnées et des impulsions, satisfaisant :

$$\theta_{ij} = \varepsilon_{ij}\theta, \quad \sigma_{ij} = \varepsilon_{ij}\sigma, \quad \text{avec} \quad \varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji} = 1. \quad (2.4)$$

Lorsque les paramètres θ_{ij} et σ_{ij} tendent vers zéro, on retrouve les relations classiques de la mécanique quantique, montrant que la géométrie non commutative en est une généralisation naturelle, avec des effets significatifs aux petites échelles.

Dans le cas particulier où les éléments de θ_{ij} sont réels :

$$\theta_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -\theta & 0 & 0 \\ \theta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

on obtient l'algèbre de Heisenberg :

$$\Delta x_i \cdot \Delta x_j \simeq \frac{\theta_{ij}}{2}. \quad (2.6)$$

2.3 La Quantification de Weyl et le Produit de Moyal

2.3.1 La Quantification de Weyl

La quantification de Weyl établit un lien fondamental entre mécanique classique et quantique en associant les variables canoniques (x, p) à des opérateurs sur un espace de Hilbert. Elle fournit une prescription systématique pour associer une fonction classique $f(x, p)$ à un opérateur quantique $W(f)$, jouant un rôle central dans les théories quantiques, notamment pour les systèmes non commutatifs.

Pour une fonction classique $f(x, p)$, l'opérateur de Weyl \widehat{f} est défini par :

$$\widehat{f} = \int d^n x d^n p f(x, p) \widehat{W}(x, p), \quad (2.7)$$

où $\widehat{W}(x, p)$, appelé **symbole de Weyl**, s'exprime comme une transformée de Fourier inverse :

$$\widehat{W}(x, p) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int d^n \xi e^{i\xi \cdot (x - \widehat{x})} e^{ip \cdot (\xi - \widehat{p})}, \quad (2.8)$$

avec \widehat{x} et \widehat{p} les opérateurs quantiques de position et d'impulsion.

2.3.2 Le Produit de Moyal (Produit Star)

Le produit star, développé par Weyl et Wigner, offre une description alternative de la mécanique quantique dans l'espace des phases. Il repose sur une déformation du produit classique des fonctions.

Soit $\widetilde{f}(k)$ la transformée de Fourier de $f(x)$ [31, 32, 33] :

$$f(x) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{-ik_\mu x^\mu} \widetilde{f}(k), \quad \widetilde{f}(k) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D x e^{ik_\mu x^\mu} f(x). \quad (2.9)$$

Le symbole de Weyl est défini par :

$$w(f) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{ik_\mu x^\mu} \widetilde{f}(k), \quad w(g) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{ik_\mu x^\mu} \widetilde{g}(k). \quad (2.10)$$

L'opérateur de Weyl est hermitien si $f(x)$ et $g(x)$ sont réelles. Le produit de deux opérateurs

de Weyl correspond au produit star des fonctions associées :

$$w(f)w(g) = w(f * g). \quad (2.11)$$

2.3.2.1 Démonstration

– Le premier terme de l'équation (2.11) s'écrit :

$$\begin{aligned} w(f)w(g) &= (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{ik_\mu x^\mu} \tilde{f}(k) \cdot (2\pi)^{-D/2} \int d^D k' e^{ik'_\mu x^\mu} \tilde{g}(k') \\ &= (2\pi)^{-D} \iint d^D k d^D k' \tilde{f}(k) \tilde{g}(k') e^{i(k_\mu + k'_\mu)x^\mu}. \end{aligned}$$

En appliquant la relation de Baker-Campbell-Hausdorff [29, 34, 35] :

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\dots} \quad (2.12)$$

valable pour $[[A, B], B] = [[A, B], A] = 0$, on obtient :

$$w(f)w(g) = (2\pi)^{-D} \iint d^D k d^D k' \tilde{f}(k) \tilde{g}(k') e^{i(k_\mu + k'_\mu)x^\mu} e^{-\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} k_\mu k'_\nu}. \quad (2.13)$$

Par le changement de variable $k + k' = q$, on trouve :

$$w(f)w(g) = (2\pi)^{-D} \iint d^D k d^D q \tilde{f}(k) \tilde{g}(q - k) e^{iq_\mu x^\mu} e^{-\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} k_\mu q_\nu}, \quad (2.14)$$

où on a utilisé l'antisymétrie de $\theta^{\mu\nu}$.

– Le deuxième terme de (2.11) s'écrit :

$$w(f * g) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D q e^{iq_\mu x^\mu} \widetilde{(f * g)}(q). \quad (2.15)$$

En comparant (2.14) et (2.15), on déduit :

$$\widetilde{(f * g)}(q) = \int d^D k \tilde{f}(k) \tilde{g}(q - k) e^{-\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} k_\mu q_\nu}. \quad (2.16)$$

Le développement de Taylor donne [29] :

$$f(x) \exp\left(\frac{i}{2} \overleftarrow{\partial}_\mu \theta^{\mu\nu} \overrightarrow{\partial}_\nu\right) g(x) = f(x)g(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{i}{2}\right)^n \frac{1}{n!} \theta^{\mu_1\nu_1} \dots \theta^{\mu_n\nu_n} \partial_{\mu_1} \dots \partial_{\mu_n} f(x) \partial_{\nu_1} \dots \partial_{\nu_n} g(x). \quad (2.17)$$

Finalement, le produit star entre deux fonctions différentiables s'écrit au premier ordre en θ [36, 37] :

$$(f * g)(x) = f(x) \exp\left(\frac{i}{2} \overleftarrow{\partial}_\mu \theta^{\mu\nu} \overrightarrow{\partial}_\nu\right) g(x) \Big|_{x=y}, \quad (2.18)$$

soit :

$$f * g = f(x)g(x) + \frac{i}{2} \theta^{\mu\nu} \partial_\mu f(x) \partial_\nu g(x) + \mathcal{O}(\theta^2) \Big|_{x=y}. \quad (2.19)$$

Dans la limite commutative ($\theta^{\mu\nu} \rightarrow 0$), on retrouve le produit classique :

$$(f * g)(x) \rightarrow f(x)g(x). \quad (2.20)$$

2.3.3 Propriétés du Produit Star

Le produit star possède plusieurs propriétés fondamentales [30] :

1. Non-commutativité Le produit star est généralement non commutatif :

$$f(x) * g(x) \neq g(x) * f(x), \quad (2.21)$$

avec la relation :

$$g(x) * f(x) = f(x) * g(x) \Big|_{\theta=-\theta}. \quad (2.22)$$

La différence est donnée par le *crochet de Moyal* :

$$[f(x), g(x)]_* = f(x) * g(x) - g(x) * f(x) = i\hbar \{f(x), g(x)\}, \quad (2.23)$$

où $\{f, g\}$ est le crochet de Poisson classique :

$$\{f(x), g(x)\} = \partial_x f(x) \partial_p g(x) - \partial_p f(x) \partial_x g(x). \quad (2.24)$$

2. Associativité Pour toutes fonctions $f, g,$ et h :

$$(f(x) * g(x)) * h(x) = f(x) * (g(x) * h(x)). \quad (2.25)$$

3. Conjugaison complexe Pour des fonctions complexes :

$$(f(x) * g(x))^* = g(x)^* * f(x)^*. \quad (2.26)$$

4. Élément neutre La fonction constante 1 est neutre :

$$f * 1 = 1 * f = f. \quad (2.27)$$

5. Symétries Le produit star est invariant sous transformations linéaires :

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu, \quad \theta^{\mu\nu} \rightarrow \theta'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma \theta^{\rho\sigma}. \quad (2.28)$$

6. Intégration En raison de l'antisymétrie de θ :

$$\int (f * g)(x) d^4x = \int (f \cdot g)(x) d^4x. \quad (2.29)$$

On en déduit la propriété cyclique :

$$\int (f_1 * \dots * f_n)(x) d^4x = \int (f_n * f_1 * \dots * f_{n-1})(x) d^4x. \quad (2.30)$$

7. Règle de Leibniz La dérivation satisfait :

$$\partial_\mu (f * g) = \partial_\mu f * g + f * \partial_\mu g. \quad (2.31)$$

2.4 L'équation de Schrödinger en espace non commutatif

En espace non commutatif, l'équation de Schrödinger est modifiée par l'introduction du produit star entre le hamiltonien et la fonction d'onde [28, 38, 39] :

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{\mathbf{x}}) * \Psi(\hat{\mathbf{x}}, t) = E\Psi(\hat{\mathbf{x}}, t), \quad (2.32)$$

où \hat{H} est le hamiltonien. Pour un hamiltonien générique comprenant une énergie cinétique et un potentiel $V(\hat{\mathbf{x}})$, l'équation devient :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\hat{\mathbf{x}}, t) = \left[\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}) \right] * \Psi(\hat{\mathbf{x}}, t). \quad (2.33)$$

Le produit star entre le potentiel et la fonction d'onde se définit par :

$$V(\mathbf{x})\Psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \mathbf{V}(\hat{\mathbf{x}}) * \Psi(\hat{\mathbf{x}}, t). \quad (2.34)$$

Mezincescu [40] a montré la relation :

$$V(\hat{\mathbf{x}}) * \Psi(\hat{\mathbf{x}}) = V\left(\hat{\mathbf{x}} - \frac{\hat{\mathbf{P}}}{2}\right) \Psi(\hat{\mathbf{x}}, t). \quad (2.35)$$

Démonstration : À partir des équations (2.18) et (2.19), on peut écrire :

$$V(\hat{\mathbf{x}}) * \Psi(\hat{\mathbf{x}}) = V(\hat{\mathbf{x}})\Psi(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{2}\right)^n \partial_{\mu_1} \cdots \partial_{\mu_n} V(\hat{\mathbf{x}}) \theta^{\mu_1 \nu_1} \cdots \theta^{\mu_n \nu_n} \partial_{\nu_1} \cdots \partial_{\nu_n} \Psi(\hat{\mathbf{x}}). \quad (2.36)$$

En utilisant $\partial_{\nu} = \frac{\partial}{\partial x^{\nu}}$ et $ip_{\nu} = \hbar \frac{\partial}{\partial x^{\nu}}$ (avec $\hbar = 1$), on obtient :

$$V(\hat{\mathbf{x}}) * \Psi(\hat{\mathbf{x}}) = V(\hat{\mathbf{x}})\Psi(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{2}\right)^n \partial_{\mu_1} \cdots \partial_{\mu_n} V(\hat{\mathbf{x}}) \theta^{\mu_1 \nu_1} \cdots \theta^{\mu_n \nu_n} (i)^n p_{\nu_1} \cdots p_{\nu_n} \Psi(\hat{\mathbf{x}}). \quad (2.37)$$

Avec la relation [40] :

$$\hat{p}^{\nu_n} = \theta^{\mu_n \nu_n} p_{\nu_n}, \quad (2.38)$$

on trouve :

$$V(\widehat{\mathbf{x}}) * \Psi(\widehat{\mathbf{x}}) = V(\widehat{\mathbf{x}})\Psi(\widehat{\mathbf{x}}) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{2}\right)^n \partial_{\mu_1} \cdots \partial_{\mu_n} V(\widehat{\mathbf{x}}) \widehat{p}^{\nu_1} \cdots \widehat{p}^{\nu_n} \Psi(\widehat{\mathbf{x}}). \quad (2.39)$$

En appliquant la transformée de Fourier à $V(\widehat{\mathbf{x}})$ et en sommant la série, on aboutit finalement à :

$$V(\widehat{\mathbf{x}}) * \Psi(\widehat{\mathbf{x}}) = V\left(\mathbf{x} - \frac{\widetilde{\mathbf{p}}}{2}\right) \Psi(\widehat{\mathbf{x}}, t). \quad (2.40)$$

2.5 Le Décalage de Bopp

Le décalage de Bopp permet d'exprimer les opérateurs non commutatifs \widehat{x}_i et \widehat{p}_i en termes de variables commutatives x_i et p_i [39, 40, 41] :

$$\widehat{x}_i = x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_j, \quad (2.41)$$

$$\widehat{p}_j = p_j. \quad (2.42)$$

Dans un espace à deux dimensions ($D = 2$) avec $\theta_{ij} = \varepsilon_{ij}\theta$ et $\varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji} = 1$, ces transformations deviennent :

$$\begin{cases} \widehat{x} = x - \frac{\theta}{2\hbar} p_y, \\ \widehat{p}_y = p_y, \end{cases} \quad (2.43)$$

$$\begin{cases} \widehat{y} = y + \frac{\theta}{2\hbar} p_x, \\ \widehat{p}_x = p_x. \end{cases} \quad (2.44)$$

Ces transformations préservent les relations de commutation fondamentales :

$$\begin{cases} [x_i, x_j] = i\theta_{ij}, \\ [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \\ [p_i, p_j] = 0. \end{cases} \quad (2.45)$$

2.5.1 Démonstration des relations de commutation

– Pour le commutateur $[x_i, x_j]$:

$$\begin{aligned} [x_i, x_j] &= \left[\hat{x}_i + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_j, \hat{x}_j + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_i \right] \\ &= i\theta_{ij} + \frac{\theta_{ji}}{2\hbar} (i\hbar) + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} (-i\hbar) \\ &= i\theta_{ij}, \end{aligned}$$

confirmant la première relation.

– Pour le commutateur $[x_i, p_j]$:

$$[x_i, p_j] = \left[\hat{x}_i + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_j, \hat{p}_j \right] \quad (2.46)$$

$$= i\hbar\delta_{ij}, \quad (2.47)$$

ce qui établit la seconde relation.

2.6 L'Atome d'Hydrogène en Espace Non Commutatif

2.6.1 Introduction et Hamiltonien de Base

L'atome d'hydrogène représente un système quantique fondamental constitué d'un proton et d'un électron liés par interaction coulombienne. Dans le cadre de l'espace non commutatif, ce système nécessite une reformulation des relations de commutation spatiales, offrant ainsi une généralisation des lois de la mécanique quantique standard.

Le hamiltonien classique s'exprime par :

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}, \quad (2.48)$$

où :

- Ze^2/r représente le potentiel coulombien (avec $Z = 1$ pour l'hydrogène)
- m désigne la masse de l'électron

– $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ est la distance radiale

2.6.2 Transformation Non Commutative

En espace non commutatif, les coordonnées subissent la transformation de Bopp-Shift :

$$\widehat{x}_i = x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_j, \quad \widehat{p}_i = p_i. \quad (2.49)$$

Le potentiel coulombien devient alors :

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{\sqrt{\widehat{x}_i \widehat{x}_i}} = -\frac{Ze^2}{\sqrt{(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_j)(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_j)}}. \quad (2.50)$$

2.6.3 Développement Perturbatif du Potentiel

En effectuant un développement limité au premier ordre en θ [6, 42, 43, 44], on obtient :

$$\begin{aligned} V(r) &= -\frac{Ze^2}{\sqrt{r^2 - \frac{x_i}{\hbar} \theta_{ij} p_j + \mathcal{O}(\theta^2)}} \\ &= -\frac{Ze^2}{r} \left(1 - \frac{x_i}{\hbar r^2} \theta_{ij} p_j + \mathcal{O}(\theta^2)\right)^{-1/2} \\ &= -\frac{Ze^2}{r} \left(1 + \frac{x_i}{2\hbar r^2} \theta_{ij} p_j + \mathcal{O}(\theta^2)\right). \end{aligned} \quad (2.51)$$

En introduisant le tenseur antisymétrique $\theta_{ij} = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \theta_k$ où ϵ_{ijk} est le symbole de Levi-Civita [6], le potentiel prend la forme :

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{4\hbar r^3} \sum x_i \epsilon_{ijk} \theta_k p_j + \mathcal{O}(\theta^2). \quad (2.52)$$

Ce qui s'exprime plus simplement en termes du moment angulaire orbital $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{4\hbar^3} \frac{(\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\theta})}{r^3}. \quad (2.53)$$

2.6.4 Hamiltonien Effectif

L'opérateur hamiltonien complet en espace non commutatif devient :

$$H(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{4\hbar^3} \frac{(\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\theta})}{r^3}. \quad (2.54)$$

On distingue :

- Le terme coulombien standard (premier ordre)
- Un terme correctif dû à la non-commutativité, proportionnel à $\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\theta}$

L'équation de Schrödinger correspondante s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2 \theta}{2\hbar r^3} L_z \right] \Psi. \quad (2.55)$$

2.6.5 Corrections Energétiques

La théorie des perturbations permet d'évaluer l'impact de la non-commutativité sur les niveaux d'énergie :

$$E_{n,l,m_l} = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2} + \frac{Ze^2\theta m_l}{2\hbar} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n,l}, \quad (2.56)$$

où $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$ est la Valeur moyenne de $\frac{1}{r^3}$ pour les états de l'atome d'hydrogène :

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n,l} = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}. \quad (2.57)$$

L'étude de l'atome d'hydrogène dans un espace non commutatif fournit une perspective innovante sur les impacts de la non-commutativité spatiale en mécanique quantique. Elle permet d'approfondir notre compréhension des phénomènes microscopiques tout en ouvrant de nouvelles voies pour explorer les fondements de la physique, avec des implications significatives pour les théories de gravitation quantique et les modèles au-delà du standard. 38

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

Chapitre 3

Solution de l'Equation de Schrödinger à Potentiel de Kratzer en Espace Non Commutatif

3.1 Introduction

En mécanique quantique, la recherche de solutions analytiques exactes à l'équation de Schrödinger constitue un enjeu fondamental pour la compréhension approfondie des systèmes quantiques. Toutefois, en raison de la complexité inhérente de nombreux potentiels d'interaction, de telles solutions demeurent rares. Il est donc souvent nécessaire de recourir à des méthodes de résolution approchée afin d'obtenir des informations quantitatives précises sur les propriétés des états quantiques. Lorsqu'on considère la forme spécifique des potentiels intervenant dans l'équation de Schrödinger, il devient possible de modéliser de manière fidèle certains états liés, qui présentent un intérêt particulier dans l'étude des propriétés spectroscopiques et de liaison, notamment dans les systèmes moléculaires.

Dans cette optique, le potentiel de Kratzer [45, 46] s'est imposé comme l'un des modèles les plus efficaces et les plus largement utilisés pour décrire les interactions moléculaires. Sa forme fonctionnelle, intégrant à la fois des termes attractifs et répulsifs, permet une modélisation fine des forces interatomiques dans les molécules diatomiques. En physique atomique et moléculaire, ce potentiel joue un rôle central dans l'analyse des spectres vibrationnels et rotationnels, fournissant des informations détaillées sur l'énergie des états liés et permettant de prédire

leur stabilité. En chimie quantique, il contribue également à une meilleure compréhension des interactions interatomiques ainsi que des comportements dynamiques des molécules.

Le potentiel de Kratzer, résultant de la combinaison d'un terme coulombien attractif et d'un terme répulsif en $1/r^2$, est aussi utilisé pour modéliser l'interaction entre l'électron externe et le noyau dans les métaux alcalins [46]. Ce modèle prend en compte l'effet d'écran des électrons internes à travers un terme additionnel, qui peut être interprété comme l'influence d'un dipôle central dirigé vers l'électron. Cette approche permet de conserver la symétrie sphérique du système tout en affinant la description des effets de polarisation électronique [47]. Par conséquent, ce potentiel s'avère pertinent pour décrire les structures électroniques fines ainsi que les transitions énergétiques dans les métaux alcalins.

Dans un contexte où les problèmes quantiques admettant des solutions analytiques exactes sont rares [48], le potentiel de Kratzer se distingue par sa solvabilité, ce qui en fait un outil précieux tant pour l'étude théorique que pour la validation des méthodes approchées [49, 50, 51]. Sa capacité à modéliser avec précision les interactions au sein des systèmes moléculaires, tout en permettant l'obtention d'expressions fermées pour les énergies et les fonctions d'onde, en fait un excellent candidat pour tester des techniques analytiques et perturbatives dans l'analyse des phénomènes quantiques complexes.

À ce titre, Bayrak [52] a proposé une démonstration analytique complète mettant en évidence la pertinence de l'obtention explicite des valeurs propres dans les problèmes de chimie théorique. Cette démarche permet de déterminer avec précision les niveaux d'énergie des systèmes quantiques, ce qui est fondamental pour la compréhension de leur structure électronique et de leur dynamique.

Par ailleurs, notre étude de la littérature révèle un intérêt soutenu pour le potentiel de Kratzer, tant dans le cadre de la mécanique quantique relativiste que non relativiste [53, 54, 55, 56], ainsi que dans le contexte plus récent de la mécanique quantique non commutative [57, 58, 59, 60, 61, 62]. Des travaux ont également exploré ce potentiel dans des espaces bidimensionnels et tridimensionnels non commutatifs [63, 64], mettant en lumière les effets des corrections relativistes et non commutatives sur les propriétés spectrales et dynamiques des

systèmes quantiques. Ces recherches enrichissent notre compréhension des états d'énergie, des symétries sous-jacentes et des mécanismes fondamentaux dans divers régimes quantiques, et confirment l'importance théorique et pratique du potentiel de Kratzer dans l'étude moderne des systèmes atomiques et moléculaires.

3.1.1 Le potentiel de Kratzer

Le potentiel de Kratzer, défini par [45, 52, 65, 66]

$$V(r) = -2D \left(\frac{a}{r} - \frac{1}{2} \frac{a^2}{r^2} \right), \quad (3.1)$$

présente les caractéristiques remarquables suivantes :

- Un minimum d'énergie $V(r) = -D$ où D représente l'énergie de dissociation
- Une distance interatomique d'équilibre a
- Une combinaison unique de termes attractif ($1/r$) et répulsif ($1/r^2$)

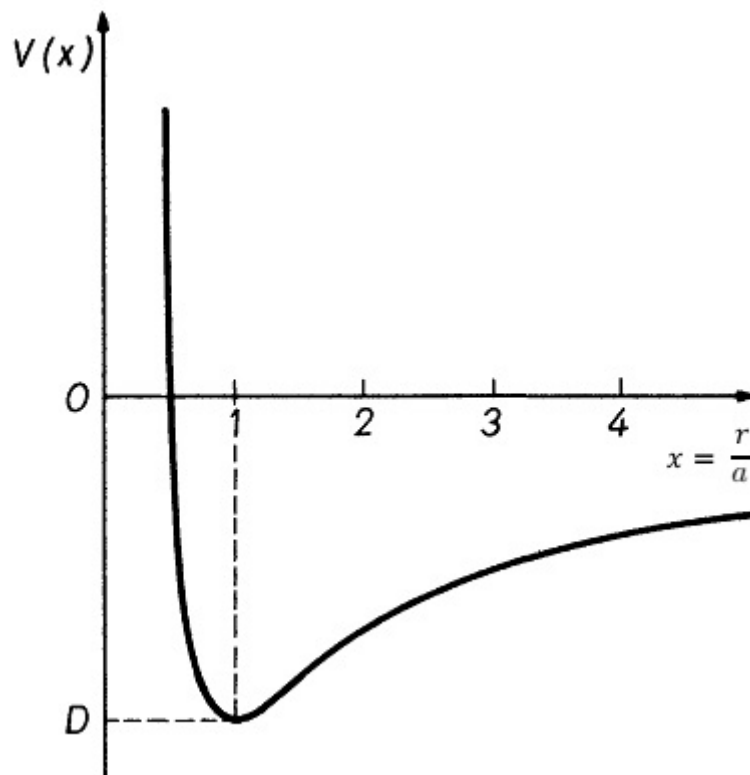


FIGURE 3.1 – Kratzer potential [65].

3.1.2 Applications et intérêt scientifique

Le potentiel de Kratzer trouve des applications dans divers domaines :

- **Spectroscopie moléculaire** : Analyse des spectres vibrationnels et rotationnels
- **Chimie quantique** : Étude des interactions interatomiques
- **Physique des métaux alcalins** : Description des électrons externes

Son importance réside notamment dans sa solvabilité analytique [49, 50, 51], ce qui en fait un cas test précieux pour :

- La validation des méthodes approchées
- L'étude des états liés quantiques
- L'analyse des corrections relativistes et non commutatives [57, 58]

3.2 Résolution de l'équation de Schrödinger avec potentiel de Kratzer

3.2.1 Formulation du problème

L'équation de Schrödinger stationnaire avec le potentiel de Kratzer s'écrit :

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + 2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{1}{2} \frac{r_e^2}{r^2} \right) \right] \psi = 0. \quad (3.2)$$

En utilisant la décomposition standard en coordonnées sphériques :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} R_l(r) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (3.3)$$

et les variables adimensionnées :

$$x = \frac{r}{r_e}, \quad \beta^2 = -\frac{2mr_e^2}{\hbar^2} E, \quad \gamma^2 = \frac{2mr_e^2}{\hbar^2} 2D_e, \quad (3.4)$$

on obtient l'équation radiale :

$$\frac{d^2\chi_l}{dx^2} + \left[-\beta^2 + \frac{2\gamma^2}{x} - \frac{\gamma^2 + l(l+1)}{x^2} \right] \chi_l = 0. \quad (3.5)$$

3.2.2 Analyse asymptotique

3.2.2.1 Comportement à l'infini ($x \rightarrow \infty$)

Pour $x \rightarrow \infty$, l'équation se réduit à :

$$\frac{d^2\chi_l}{dx^2} - \beta^2\chi_l \approx 0, \quad (3.6)$$

dont la solution physiquement acceptable est :

$$\chi_l \sim e^{-\beta x}. \quad (3.7)$$

3.2.2.2 Comportement à l'origine ($x \rightarrow 0$)

Près de l'origine, l'équation devient :

$$\frac{d^2\chi_l}{dx^2} - \frac{\gamma^2 + l(l+1)}{x^2}\chi_l \approx 0. \quad (3.8)$$

La solution régulière s'écrit :

$$\chi_l \sim x^\lambda, \quad (3.9)$$

où λ satisfait [65] :

$$\lambda(\lambda - 1) = \gamma^2 + l(l+1). \quad (3.10)$$

La solution positive est :

$$\lambda = \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}. \quad (3.11)$$

3.2.3 Solution générale

En combinant les comportements asymptotiques, nous posons :

$$\chi_l(x) = x^\lambda e^{-\beta x} f(x). \quad (3.12)$$

La substitution dans l'équation radiale (3.5) conduit à :

$$x \frac{d^2 f}{dx^2} + (2\lambda - 2\beta x) \frac{df}{dx} + (-2\lambda\beta + 2\gamma^2) f = 0. \quad (3.13)$$

Cette équation est une forme générale de l'équation de Kummer, qui est une équation de la série hypergéométrique confluyente. Elle peut être transformée en utilisant la variable $Z = 2\beta x$ au lieu de x , ce qui conduit à l'expression suivante :

$$f(x) = {}_1F_1\left(\lambda - \frac{\gamma^2}{\beta}; 2\lambda; 2\beta x\right), \quad (3.14)$$

où :

$${}_1F_1(a; b; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!}, \quad (3.15)$$

avec $(a)_n = a(a+1)\cdots(a+n-1)$ le symbole de Pochhammer.

3.3 Spectre d'énergie

3.3.1 États liés ($E < 0$)

La condition de quantification énergétique s'obtient en imposant que la série hypergéométrique se tronque en polynôme :

$$\lambda - \frac{\gamma^2}{\beta} = -n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.16)$$

Ceci conduit au spectre discret :

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2mr_e^2} \frac{\gamma^4}{(n + \lambda)^2}, \quad (3.17)$$

En appliquant la relation (3.11) à l'équation précédente, nous pouvons exprimer cette équation de manière explicite en utilisant des nombres quantiques :

$$E_{n,l} = -\frac{\hbar^2}{2mr_e^2} \gamma^4 \left(n + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + \gamma^2} \right)^{-2}. \quad (3.18)$$

3.3.2 États de diffusion ($E > 0$)

Pour les énergies positives, β devient imaginaire pur ($\beta = ik$), et la solution prend la forme :

$$\chi_l(r) = r^\lambda e^{ikr} {}_1F_1 \left(\lambda - i \frac{\gamma^2}{kr_e}; 2\lambda; -2ikr \right). \quad (3.19)$$

Ces solutions présentent un comportement oscillatoire asymptotique caractéristique des états non liés, avec une phase additionnelle due au terme coulombien.

3.4 Interprétation physique

Les solutions obtenues révèlent plusieurs aspects importants :

- La condition de quantification (3.16) montre comment le potentiel de Kratzer confine les états quantiques
- Le spectre d'énergie (3.18) présente une dépendance non triviale en n et l
- La solution de diffusion (3.19) contient des informations sur les sections efficaces

Ces résultats trouvent des applications dans :

- L'analyse spectroscopique fine des molécules diatomiques
- L'étude des systèmes quantiques en présence de potentiels singuliers
- La validation des méthodes numériques en chimie quantique

3.5 Solution de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Kratzer dans un espace non commutatif

Afin de résoudre l'équation de Schrödinger associée à un potentiel de Kratzer dans un espace non commutatif, nous utilisons la transformation de Bopp-Shift donnée par l'expression (2.41), appliquée à l'expression du potentiel de Kratzer (3.1). Ainsi, nous obtenons :

$$\hat{x}_i = x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_j. \quad (3.20)$$

Où, selon [6, 42, 67], on a :

$$r = \sqrt{\widehat{x}_i \widehat{x}_i}. \quad (3.21)$$

Il est désormais possible d'expliciter la relation suivante [68] :

$$V^{NC}(r) = -2D_e \left(\frac{r_e}{\sqrt{\widehat{x}_i \widehat{x}_i}} - \frac{r_e^2}{2(\widehat{x}_i \widehat{x}_i)} \right). \quad (3.22)$$

En remplaçant \widehat{x}_i par l'expression donnée dans (3.20), on obtient :

$$\begin{aligned} V^{NC}(r) &= -2D_e \left(\frac{r_e}{\sqrt{(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j)(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j)}} - \frac{r_e^2}{2(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j)(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j)} \right) \\ &= -2D_e \left(\frac{r_e}{\left(r^2 - \frac{\theta_{ij}}{\hbar} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2)\right)^{1/2}} - \frac{r_e^2}{2\left(r^2 - \frac{\theta_{ij}}{\hbar} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2)\right)} \right) \\ &= -2D_e \left(\frac{r_e}{r \left(1 - \frac{\theta_{ij}}{\hbar r^2} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2)\right)^{1/2}} - \frac{r_e^2}{2r^2 \left(1 - \frac{\theta_{ij}}{\hbar r^2} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2)\right)} \right) \\ &= \frac{-2D_e r_e}{r} \left(1 + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar r^2} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2)\right) + \frac{D_e r_e^2}{r^2} \left(1 + \frac{\theta_{ij}}{\hbar r^2} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2)\right) \\ &= \frac{-2D_e r_e}{r} + \frac{D_e r_e^2}{r^2} - 2D_e r_e \frac{\sum \varepsilon_{ijk} \theta_k \widehat{p}_j x_i}{4\hbar r^3} + D_e r_e^2 \frac{\sum \varepsilon_{ijk} \theta_k \widehat{p}_j x_i}{2\hbar r^4}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Puisque

$$\theta_{ij} = \frac{\varepsilon_{ijk} \theta_k}{2}, \quad (3.24)$$

on a :

$$\sum \varepsilon_{ijk} \theta_k \widehat{p}_j x_i = (x_2 p_3 - x_3 p_2) \theta_1 + (x_3 p_1 - x_1 p_3) \theta_2 + (x_1 p_2 - x_2 p_1) \theta_3. \quad (3.25)$$

Ceci est équivalent à :

$$\sum \varepsilon_{ijk} \theta_k \widehat{p}_j x_i = \vec{L} \cdot \vec{\theta}. \quad (3.26)$$

Ainsi, le potentiel de Kratzer dans l'espace non commutatif devient :

$$V^{NC}(r) = -2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{D_e r_e}{2\hbar} \frac{\vec{L} \cdot \vec{\theta}}{r^3} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right). \quad (3.27)$$

Cela nous permet d'écrire :

$$V^{NC}(r) = V^C(r) - \frac{D_e r_e \vec{L} \cdot \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right), \quad (3.28)$$

où $V^C(r)$ désigne le potentiel de Kratzer classique.

L'opérateur hamiltonien dans cet espace non commutatif s'écrit alors :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V^{NC}(r). \quad (3.29)$$

L'équation de Schrödinger correspondante devient :

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) = E\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi). \quad (3.30)$$

On remplace l'équation (3.27) dans l'équation (3.30)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) - 2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) \right. \quad (3.31)$$

$$\left. - \frac{D_e r_e \vec{L} \cdot \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right] \Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) = E\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) \quad (3.32)$$

On pose la séparation des variables :

$$\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.33)$$

En injectant (3.33) dans (3.32), on obtient :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) - 2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) \right. \quad (3.34)$$

$$\left. - \frac{D_e r_e \vec{L} \cdot \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right] R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) = ER_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.35)$$

On a

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.36)$$

Finalement nous obtenons

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - 2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) \right. \quad (3.37)$$

$$\left. - \frac{D_e r_e \vec{L} \cdot \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right] R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = E R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.38)$$

3.5.1 Etude de la Partie Angulaire

L'étude de la partie angulaire dans un espace non commutatif reproduit le même calcul que dans le cas commutatif. Cela nous permet d'écrire $Y_{lm}(\theta, \varphi)$:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{4\pi} \right)^3 \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} (-1)^m p_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (3.39)$$

3.5.2 Etude de la Partie Radiale

L'expression $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ étant indépendante de r , l'équation se réduit à une équation différentielle radiale :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - 2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{D_e r_e \vec{L} \cdot \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right] R_{nl}(r) = E R_{nl}(r). \quad (3.40)$$

En utilisant le changement de variable suivant :

$$R_{nl}(r) = \frac{U(r)}{r} \quad (3.41)$$

l'équation se réécrit sous la forme :

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \left(-2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{D_e r_e \vec{L} \cdot \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) - E \right) U(r) = 0 \quad (3.42)$$

L'opérateur Hamiltonien \widehat{H}_θ peut alors être exprimé comme suit :

$$\widehat{H}_\theta = \frac{\widehat{p}^2}{2m} - 2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{D_e r_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \quad (3.43)$$

Cette formulation montre que la non-commutativité de l'espace-temps apparaît sous forme d'une perturbation. Cette perturbation est donnée par :

$$\widehat{W}_\theta = -\frac{D_e r_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \quad (3.44)$$

qui, en considérant uniquement la composante L_z de \vec{L} , devient :

$$\widehat{W}_\theta = -\frac{D_e r_e L_z \theta}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right). \quad (3.45)$$

Il est intéressant de noter que le premier terme de cette expression est très similaire à celui du couplage spin-orbite, dont l'expression classique est donnée par :

$$\widehat{W}_{s.o} = -\frac{e^2}{2m^2 c^2} \left(\frac{\vec{L} \cdot \vec{S}}{r^3} \right). \quad (3.46)$$

En identifiant la constante de non-commutativité θ au moment angulaire de spin S , il devient évident que cette constante joue un rôle analogue au spin.

En d'autres termes, on peut dire que le spin émerge de la non-commutativité de l'espace. Dans la discussion qui suit, nous considérerons la non-commutativité comme une perturbation, afin d'identifier et d'estimer les corrections aux niveaux d'énergie du potentiel de Kratzer.

3.5.3 Correction des énergies pour le potentiel de Kratzer dans le cas NC

Les corrections au premier ordre de l'énergie s'expriment comme suit

$$\Delta E_n^{(1)} = \left\langle \psi_{n,l,m_l} \mid \widehat{W}_\theta \mid \psi_{n,l,m_l} \right\rangle \quad (3.47)$$

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{D_e r_e \theta}{2\hbar} \int_0^\infty dr r^2 \int_0^{4\pi} \left[\left\langle \psi_{n,l,m_l}^+ \left| \frac{L_z}{r^3} \right| \psi_{n,l,m_l} \right\rangle - \left\langle \psi_{n,l,m_l}^+ \left| \frac{r_e L_z}{r^4} \right| \psi_{n,l,m_l} \right\rangle \right] d\Omega \quad (3.48)$$

Utilisons l'écriture suivante

$$|\psi_{n,l,m_l}\rangle = |n, l, m_l\rangle \quad (3.49)$$

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{D_e r_e \theta m_l \hbar}{2\hbar} \left(\left\langle n, l, m_l \left| \frac{1}{r^3} \right| n, l, m_l \right\rangle - \left\langle n, l, m_l \left| \frac{r_e}{r^4} \right| n, l, m_l \right\rangle \right) \quad (3.50)$$

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{D_e r_e \theta m_l}{2} \left(\left\langle n, l, m_l \left| \frac{1}{r^3} \right| n, l, m_l \right\rangle - \left\langle n, l, m_l \left| \frac{r_e}{r^4} \right| n, l, m_l \right\rangle \right). \quad (3.51)$$

Car

$$\langle n, l, m_l | L_z | n, l, m_l \rangle = m_l \hbar \quad (3.52)$$

Donc l'équation (3.47) devienne :

$$\Delta E_n^{(1)} = \left\langle n, l, m_l \left| -\frac{D_e r_e L_z \theta}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right| n, l, m_l \right\rangle \quad (3.53)$$

où

$$\left\langle n, l, m_l \left| \frac{1}{r^3} \right| n, l, m_l \right\rangle = \int_0^\infty dr r^2 R_{nl}^*(r) \frac{1}{r^3} R_{nl}(r) = \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \quad (3.54)$$

puisque

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{nl}^*(r) R_{nl}(r) = 1 \quad (3.55)$$

D'après les travaux de [69], nous examinons le calcul des valeurs moyennes $\langle r^k \rangle_{nl}$. Les

distinctions entre les différentes fonctions propres radiales deviennent particulièrement évidentes lorsqu'on considère les moyennes de r , représentant la distance entre l'électron et le noyau, élevées à différentes puissances. Ces valeurs moyennes, notées $\langle r^k \rangle_{nl}$, peuvent être exprimées par la relation suivante

$$\frac{k+1}{n^2} \langle r^k \rangle_{nl} - (2k+1) \frac{a_0}{z} \langle r^{k-1} \rangle_{nl} + k \left[l(l+1) + \frac{1-k^2}{4} \right] \frac{a_0^2}{z^2} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} = 0 \quad (3.56)$$

Démonstration de la relation de récurrence (3.56)

Les valeurs moyennes des puissances de la variable radiale r pour un atome d'hydrogène, caractérisé par des nombres quantiques n et l , sont définies comme suit

$$\langle r^k \rangle_{nl} = \int_0^\infty r^k [R_{nl}(r)]^2 r^2 dr \quad (3.57)$$

Ici, $R_{nl}(r)$ est une solution de l'équation différentielle radiale associée, $\widehat{H}R(r) = ER(r)$. Nous démontrons que ces valeurs sont reliées par la relation de récurrence (3.56). Pour cela, introduisons la fonction réelle $u(r)$ définie par $u = rR_{nl}(r)$, et notons ses dérivées respectives par u' et u'' . L'équation (3.57) se réécrit alors comme suit

$$\langle r^k \rangle_{nl} = \int_0^\infty r^k u^2 dr \quad (3.58)$$

Les dérivées de $R_{nl}(r)$ par rapport à r peuvent être exprimées ainsi :

$$\frac{\partial R_{nl}(r)}{\partial r} = \frac{u'}{r} - \frac{u}{r^2}, \quad \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R_{nl}(r)}{\partial r} \right) = ru'' \quad (3.59)$$

En partant de l'équation radiale $\widehat{H}R(r) = ER(r)$, nous obtenons pour u'' :

$$u'' = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2z}{a_0 r} + \frac{z^2}{n^2 a_0^2} \right] u \quad (3.60)$$

Ici, l'énergie est donnée par $E_n = -\frac{ze^2}{2a_0n^2}$. Avant d'établir directement l'équation (3.56), nous dérivons une relation intermédiaire utile en considérant l'intégrale suivante :

$$\int_0^\infty r^\nu uu' dr \quad (3.61)$$

En intégrant par parties, nous obtenons :

$$\int_0^\infty r^\nu uu' dr \Big|_0^\infty - \int_0^\infty u \frac{\partial}{\partial r} (r^\nu u) dr \quad (3.62)$$

Le premier terme disparaît, car $R(r) \rightarrow 0$ lorsque $r \rightarrow \infty$ et $u(r) \rightarrow 0$ lorsque $r \rightarrow 0$. Développant la dérivée dans le second terme, on obtient :

$$\int_0^\infty r^\nu uu' dr = -\frac{\nu}{2} \langle r^{\nu-1} \rangle_{nl} \quad (3.63)$$

Pour établir la relation de récurrence (3.56), multiplions (3.60) par $r^{k+1}u'$ et intégrons. et en intégrant sur r

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^{k+1}u'u'' dr &= l(l+1) \int_0^\infty r^{k-1}uu' dr - \frac{2z}{a_0} \int_0^\infty r^k uu' dr + \frac{z^2}{n^2 a_0^2} \int_0^\infty r^{k+1}uu' dr \quad (3.64) \\ &= \frac{l(l+1)(k-1)}{2} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} + \frac{kz}{a_0} \langle r^{k-1} \rangle_{nl} - \frac{(k+1)z^2}{2n^2 a_0^2} \langle r^k \rangle_{nl} \end{aligned}$$

L'expression intégrale située à gauche dans l'équation (3.64) peut être reformulée sous la forme suivante

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' \partial r &= - \int_0^{\infty} u' \frac{\partial}{\partial r} (r^{k+1} u') dr \\
 &= -(k+1) \int_0^{\infty} r^k u' u' dr - \int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' dr \\
 &= (k+1) \int_0^{\infty} u \frac{\partial}{\partial r} (r^k u') dr - \int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' dr \\
 &= k(k+1) \int_0^{\infty} r^{k-1} u u' dr + (k+1) \int_0^{\infty} r^k u u'' dr - \int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' dr \quad (3.65)
 \end{aligned}$$

En regroupant les deux dernières intégrales, et en utilisant l'équation (3.63), on obtient

$$\int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' dr = -\frac{k(k-1)(k+1)}{4} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} + \frac{(k+1)}{2} \int_0^{\infty} r^k u u'' dr \quad (3.66)$$

et cela en utilisant l'équation (3.63).

En remplaçant u'' dans la dernière intégrale du côté droit de l'équation (3.66) à l'aide de l'équation (3.60), on obtient

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' dr &= -\frac{(k-1)k(k+1)}{4} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} + \frac{(k+1)l(l+1)}{2} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} \quad (3.67) \\
 &\quad -\frac{(k+1)z}{a_0} \langle r^{k-1} \rangle_{nl} + \frac{(k+1)z^2}{2n^2 a_0^2} \langle r^k \rangle_{nl}
 \end{aligned}$$

En fin, combinons les équations (3.64) et (3.67), nous obtenons la relation de récurrence (3.56)

$$\frac{k+1}{n^2} \langle r^k \rangle_{nl} - (2k+1) \frac{a_0}{z} \langle r^{k-1} \rangle_{nl} + k \left[l(l+1) + \frac{1-k^2}{4} \right] \frac{a_0^2}{z^2} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} = 0 \quad (3.68)$$

En appliquant cette relation pour $k = 0, 1, -1$, nous obtenons les résultats correspondants pour $\langle r^{-1} \rangle$, $\langle r \rangle$, et $\langle 1/r^3 \rangle$ [69]

– pour $k = 0$

$$\langle r^{-1} \rangle = \frac{Z}{a_0 n^2} \quad (3.69)$$

– pour $k = 1$

$$\frac{2}{n^2} \langle r \rangle - \frac{3a_0}{Z} + l(l+1) \frac{a_0^2}{Z^2} \langle r^{-1} \rangle = 0 \quad (3.70)$$

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2Z} [3n^2 - l(l+1)] \quad (3.71)$$

– pour $k = -1$

$$\langle \frac{1}{r^3} \rangle = \frac{Z}{l(l+1)a_0} \langle \frac{1}{r^2} \rangle \quad (3.72)$$

et à partir de [69] on a

$$\langle \frac{1}{r^2} \rangle = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l + \frac{1}{2})} \quad (3.73)$$

On remplace (3.73) dans (3.72)

$$\langle \frac{1}{r^3} \rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 (l+1)(l + \frac{1}{2})l} \quad (3.74)$$

Finalement [70]

$$\langle \frac{1}{r^4} \rangle = \frac{z^4 \frac{1}{2} [3n^2 - l(l+1)]}{a_0^4 n^5 (l + \frac{3}{2})(l+1)(l + \frac{1}{2})l(l - \frac{1}{2})} \quad (3.75)$$

Passons maintenant au calcul de la première correction de l'énergie $\Delta E_n^{(1)}$. Pour ce faire, nous substituons les équations ((3.74) et (3.75) dans l'équation (3.51)

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{D_e r_e \theta m_l}{2} \left(\langle \frac{1}{r^3} \rangle - \langle \frac{r_e}{r^4} \rangle \right) \quad (3.76)$$

$$= -\frac{D_e r_e \theta m_l}{2} \left(\frac{Z^3}{a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l} - \frac{r_e Z^{4\frac{1}{2}} [3n^2 - l(l+1)]}{a_0^4 n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} \right) \quad (3.77)$$

$$= -\frac{D_e r_e \theta m_l}{2} \left(\frac{Z^3}{a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l} - \frac{r_e Z^{4\frac{1}{2}} [3n^2 - l(l+1)]}{a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2})} \right)$$

$$= -\frac{D_e r_e \theta m_l}{2} \left(\frac{Z^3 a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2})}{a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2})} - \frac{\frac{1}{2} r_e Z^4 [3n^2 - l(l+1)]}{a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2})} \right)$$

$$= -\frac{D_e r_e \theta m_l}{2} \left(\frac{Z^3 a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2}) - r_e Z^{4\frac{1}{2}} [3n^2 - l(l+1)]}{a_0^4 n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} \right) \quad (3.78)$$

On pose

$$\begin{cases} g_1 = \frac{D_e Z^4 r_e^2}{a_0^4} \\ g_2 = \frac{2D_e Z^3 r_e}{a_0^3} \end{cases} \quad (3.79)$$

Donc

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{g_2 \theta m_l}{4n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})} + \frac{g_1 \theta m_l [3n^2 - l(l+1)]}{4n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} \quad (3.80)$$

Lorsque $g_1 = 0$, le potentiel de Kratzer se réduit au potentiel de Coulomb. Par conséquent, l'équation (3.80) se simplifie et devient

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{g_2 \theta m_l Z^3 a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2})}{a_0^4 n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} \quad (3.81)$$

$$\implies \Delta E_n^{(1)} = -\frac{g_2 \theta m_l}{4n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l} \quad (3.82)$$

Cette équation fournit le même resultat pour le sepectre d'énergie d'ordre 1 que celui

obtenu de l'atome d'hydrogène [28, 6, 71, 72]

$$g_2 = 1$$

$$\Delta E_n^H = -\frac{\theta m_l}{4n^3 l(l+1)(l+\frac{1}{2})} \quad (3.83)$$

Selon la théorie des perturbations, l'équation (3.80) montre comment la non-commutativité affecte les niveaux d'énergie des molécules de type Kratzer au premier ordre. Nous désignons les états des molécules diatomiques par les nombres quantiques n , l et m_l , ce qui nous permet d'évaluer qualitativement la constante de non-commutativité de l'espace en étudiant ses effets sur les niveaux d'énergie des molécules diatomiques.

3.5.4 Spectre d'énergie du potentiel de Kratzer en espace non commutatif

3.5.4.1 Corrections énergétiques pour $n=1$ et $l=1$

L'expression générale des corrections énergétiques au premier ordre (3.80) prend des formes particulières pour le niveau fondamental ($n = 1$) avec un moment angulaire orbital $l = 1$. Dans ce cas, le nombre quantique magnétique m prend les valeurs -1 , 0 et 1 selon la relation $-l \leq m \leq l$. Les corrections énergétiques correspondantes sont :

– Pour $l = 1, m = -1$:

$$\Delta E_1^{(1)} = +\frac{g_2\theta}{12} - \frac{g_1\theta}{15} \quad (3.84)$$

– Pour $l = 1, m = 0$:

$$\Delta E_1^{(1)} = 0 \quad (3.85)$$

– Pour $l = 1, m = +1$:

$$\Delta E_1^{(1)} = -\frac{g_2\theta}{12} + \frac{g_1\theta}{15} \quad (3.86)$$

Ce résultat illustre une brisure partielle de la dégénérescence des niveaux d'énergie due à la non commutativité de l'espace, analogue à l'effet Zeeman, mais induite ici par une géométrie non commutative.

3.5.4.2 Considération du moment angulaire total

Comme le soulignent [6, 42, 71, 72], la conservation du moment angulaire total dans ce système nécessite de prendre en compte à la fois les degrés de liberté orbitaux et de spin. Une description plus complète s'obtient en remplaçant les états $|n, l, m_l\rangle$ par les états propres du moment angulaire total $|n, j, j_z\rangle$, où :

- $j = l \pm \frac{1}{2}$ est le nombre quantique du moment angulaire total.
- j_z est sa projection sur l'axe de quantification.

3.5.4.3 Expression générale des corrections énergétiques

L'expression (3.53) se généralise alors sous la forme :

$$\Delta E_n^{(1)} = \left\langle n, j, j_z \left| -\frac{D_e r_e \theta_z \hat{L}_z}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right| n, j, j_z \right\rangle \quad (3.87)$$

Les éléments de matrice de \hat{L}_z dans cette base s'expriment à l'aide des coefficients de Clebsch-Gordan [6, 72, 42, 71, 73], nous obtenons

$$\left\langle n, j, j_z \left| \hat{L}_z \right| n, j, j_z \right\rangle = \begin{cases} \left(1 - \frac{1}{2l+1}\right) j_z \hbar & \text{for } j = l + \frac{1}{2} \\ \left(1 + \frac{1}{2l+1}\right) j_z \hbar & \text{for } j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (3.88)$$

3.5.4.4 Expression finale des corrections

En combinant ces résultats avec les expressions des valeurs moyennes radiales, on obtient la correction énergétique complète :

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{D_e r_e \theta_z j_z}{2} \left(1 \mp \frac{1}{2l+1}\right) \left(\left\langle n, l', j, j_z \left| \frac{1}{r^3} \right| n, l, j, j_z \right\rangle - \left\langle n, l', j, j_z \left| \frac{r_e}{r^4} \right| n, l, j, j_z \right\rangle \right) \quad (3.89)$$

En utilisant les relations (3.79) et les expressions des valeurs moyennes radiales, on aboutit à la forme explicite :

$$\Delta E_n^{(1)} = \frac{\theta_z j_z}{4} \left[\frac{g_1 [3n^2 - l(l+1)]}{n^5 (l + \frac{3}{2})(l+1)(l + \frac{1}{2})l(l - \frac{1}{2})} - \frac{g_2}{n^3 (l+1)(l + \frac{1}{2})l} \right] \left(1 \mp \frac{1}{2l+1}\right) \quad (3.90)$$

pour les deux cas possibles :

$$j = l \pm \frac{1}{2} \quad (3.91)$$

Cette dernière expression représente la correction d'énergie induite par la non-commutativité de l'espace lorsque le couplage spin-orbite est pris en compte. Elle met en évidence une dépendance explicite à la fois au moment angulaire projeté j_z et au signe du couplage total $j = l \pm \frac{1}{2}$, ce qui conduit à un éclatement supplémentaire des niveaux quantiques. Ce phénomène constitue une signature observable potentielle de la structure non commutative de l'espace.

3.6 Couplage Spin-Orbite et Structure Fine

Le moment angulaire total \mathbf{J} d'un atome est défini comme la somme de ses moments angulaires orbital \mathbf{L} et de spin \mathbf{S} :

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (3.92)$$

Il s'agit d'une quantité conservée dans un champ central, contrairement à \mathbf{L} ou \mathbf{S} considérés séparément. En élevant cette relation au carré, on obtient :

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (3.93)$$

où \mathbf{L} et \mathbf{S} sont des opérateurs qui commutent. On en déduit l'expression :

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2). \quad (3.94)$$

Les vecteurs propres de l'opérateur hamiltonien correspondent aux vecteurs propres simultanés des trois opérateurs \mathbf{J}^2 , \mathbf{L}^2 et \mathbf{S}^2 , avec les valeurs propres respectives $\hbar^2 j(j+1)$, $\hbar^2 l(l+1)$ et $\hbar^2 s(s+1)$, où j représente le nombre quantique du moment angulaire total. L'énergie du système dépend alors explicitement de j .

3.6.1 Origine de la structure fine

La structure fine résulte principalement de deux effets relativistes :

- Une correction à l'énergie cinétique classique

- Une interaction spin-orbite entre le moment magnétique intrinsèque de l'électron et le champ magnétique interne créé par le mouvement nucléaire

L'interaction spin-orbite conduit à un déplacement énergétique donné par :

$$\Delta E_{\text{SO}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{Ze_0^2}{2m_0c^2} \frac{\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}{r^3}. \quad (3.95)$$

En tenant compte de l'équation (3.76), la correction énergétique due à l'interaction spin-orbite dans un espace non commutatif peut être formulée sous la forme :

$$\Delta E = \frac{Dr_e L_z \theta}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right). \quad (3.96)$$

3.6.2 Le Décalage de Lamb et la Correction Non Commutative

La théorie quantique relativiste prédit une dégénérescence exacte entre les niveaux $2S_{1/2}$ et $2P_{1/2}$ pour $n = 2$. Cependant, expérimentalement, il existe un intervalle d'énergie non nul, observé comme :

$$E(2S) - E(2P) \simeq 1 \text{ GHz}. \quad (3.97)$$

Le passage du niveau $2S_{1/2}$ à une énergie légèrement supérieure à celle prédite par la solution de Dirac (E_{Dirac}) représente environ un dixième de l'intervalle entre les deux niveaux de structure fine :

$$E(2P_{3/2}) - E(2P_{1/2}) \simeq 11 \text{ GHz}. \quad (3.98)$$

Bien que ce décalage soit relativement petit, il a eu une importance historique considérable pour la validation expérimentale de l'électrodynamique quantique (QED). Ainsi, les états $|n = 2, l = 1, s = 1/2\rangle$ se séparent en deux sous-niveaux selon la valeur du moment angulaire total j [72, 47] :

$$j = \begin{cases} 3/2 & \rightarrow {}^2P_{3/2} \\ 1/2 & \rightarrow {}^2P_{1/2} \end{cases}, \quad (3.99)$$

tandis que l'état $|n = 2, l = 0, s = 1/2\rangle$ correspond uniquement à :

$$j = 1/2 \quad \rightarrow \quad {}^2S_{1/2}. \quad (3.100)$$

L'équation (3.90) montre que les niveaux d'énergie dépendent des nombres quantiques l , n et j_z , où j_z prend les valeurs :

$$j_z = -j, -j + 1, \dots, +j. \quad (3.101)$$

La présence explicite de j_z implique un éclatement supplémentaire des niveaux, distinct du spectre habituel de l'atome d'hydrogène. Cet éclatement est principalement dû au second terme de l'équation (3.90), qui résulte de l'effet du potentiel de Kratzer en espace non commutatif.

Plus précisément, les premiers termes de l'équation (3.90) subissent les corrections suivantes pour les états ${}^2S_{1/2}$ et ${}^2P_{1/2}$:

$${}^2P_{1/2} = \begin{cases} {}^2P_{+1/2} \\ {}^2P_{-1/2} \end{cases}, \quad {}^2S_{1/2} = \begin{cases} {}^2S_{+1/2} \\ {}^2S_{-1/2} \end{cases}. \quad (3.102)$$

Tandis que pour l'état ${}^2P_{3/2}$, on observe une structure plus riche :

$${}^2P_{3/2} = \begin{cases} {}^2P_{+3/2} \\ {}^2P_{+1/2} \\ {}^2P_{-1/2} \\ {}^2P_{-3/2} \end{cases}. \quad (3.103)$$

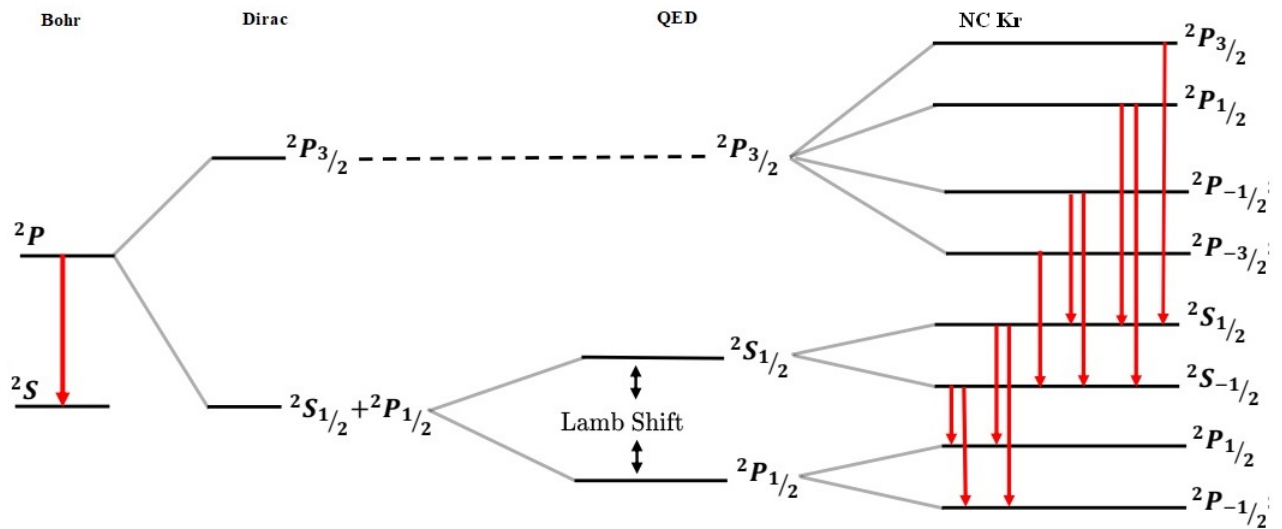


FIGURE 3.2 – Spectre de la molécule de Kratzer dans les espaces non commutatifs.

La figure 3.2 illustre un exemple "toy model" présentant l'effet de la non-commutativité de l'espace dans le cas de la molécule de Kratzer. À la limite classique (cf. équation (3.83)), on retrouve le spectre de l'atome d'hydrogène. Ce n'est qu'à partir de corrections ultérieures que les effets de la non-commutativité apparaissent, analogues à ceux observés dans l'effet Zeeman [21] et l'effet Paschen-Back, où l'interaction avec un champ magnétique supprime la dégénérescence initiale des niveaux.

Globalement, on peut prédire une corrélation causale entre la non-commutativité de l'espace et la levée de dégénérescence des niveaux atomiques.

En ce qui concerne les règles de sélection, seules les transitions suivantes sont autorisées : la transition ${}^2S_{1/2}$ vers ${}^2P_{1/2}$ et la transition ${}^2S_{1/2}$ vers ${}^2P_{3/2}$

De plus, le spectre obtenu correspond à celui d'un atome d'hydrogène dans un espace non commutatif lorsque $g_1 = 0$ dans l'équation (3.90), entraînant la disparition de la partie supérieure du spectre. Ceci confirme pleinement nos résultats issus de l'équation (3.83), en accord avec les travaux précédents [71, 72].

En résumé, nous avons dérivé le spectre énergétique d'une molécule diatomique en interaction avec un potentiel de Kratzer dans un espace non commutatif, mettant en évidence l'impact de la géométrie de l'espace sur les propriétés spectroscopiques.

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

Chapitre 4

Solution de L'équation de Schrödinger Pour les Atomes Hydrogénoïde

4.1 Introduction

Un atome hydrogénoïde est un système constitué d'un noyau central et d'une unique particule chargée en orbite, telle qu'un électron. Cette configuration, qui imite celle de l'atome d'hydrogène — l'élément chimique le plus simple et le mieux étudié — joue un rôle fondamental en physique. Les atomes hydrogénoïdes permettent d'explorer les principes fondamentaux régissant la structure atomique, notamment les interactions électrostatiques entre les particules chargées et leur organisation quantique sous l'influence d'un champ électromagnétique. Ils servent également des modèles idéaux pour tester les théories de la mécanique quantique ainsi que les corrections relativistes.

Dans cette section, nous nous proposons d'analyser le mouvement d'une particule chargée dans le champ électrostatique créé par un noyau de charge $+Ze$. En particulier, nous aborderons deux cas distincts d'atomes hydrogénoïdes : les atomes muoniques et l'atome d'hélium

4.1.1 Atomes Muoniques

Nous considérons tout d'abord les atomes muoniques, qui représentent une forme exotique d'atomes hydrogénoïdes. Ces systèmes se forment lorsqu'un muon — particule élémentaire de charge négative et de masse environ 200 fois supérieure à celle de l'électron — remplace l'élec-

tron dans un atome. Un muon lié à un noyau de charge $+Ze$ forme ainsi un *atome muonique*. En raison de sa masse plus élevée, le muon orbite beaucoup plus près du noyau que l'électron, amplifiant ainsi considérablement les effets relativistes et les corrections de structure fine. Ces caractéristiques rendent les atomes muoniques particulièrement intéressants pour l'étude des interactions fondamentales et pour tester des théories telles que la chromodynamique quantique à courtes distances.

4.1.2 Atome d'Hélium

Nous étudions ensuite le cas où $Z = 2$, qui correspond à l'hélium (He). Ce système est constitué d'un noyau formé de deux protons et généralement de deux neutrons, autour duquel gravite un unique électron. L'hélium constitue un modèle classique d'atome hydrogénoïde avec une charge nucléaire accrue. Comparé à l'atome d'hydrogène, la force d'attraction exercée par le noyau est deux fois plus intense, ce qui modifie les niveaux d'énergie et les propriétés spectroscopiques du système. L'étude de l'hélium est essentielle pour comprendre l'influence de la charge nucléaire sur les transitions électroniques et sur les propriétés quantiques dans les atomes multi-chargés. De plus, en astrophysique, ces ions jouent un rôle clé dans les environnements stellaires, notamment dans les plasmas chauds.

4.2 Atomes Hydrogénoïdes de Type Muonique

4.2.1 Hamiltonien du Système

Le système étudié peut être considéré comme un problème à deux corps, comprenant un noyau et une particule chargée, telle qu'un électron ou un muon. Dans le cas de l'atome d'hydrogène, les particules concernées sont l'électron et le proton, ce dernier ayant une masse bien plus grande que celle de l'électron.

Lorsque l'interaction entre deux particules dépend uniquement de la distance qui les sépare, il est possible de simplifier l'étude en la ramenant à un problème à un seul corps. Cette simplification s'effectue en adoptant le référentiel du centre de masse du système, où le mou-

vement est décrit par une particule fictive de masse réduite μ , définie par [12, 13, 8, 11] :

$$\mu = \frac{mm_p}{m + m_p}. \quad (4.1)$$

La masse du proton m_p étant environ 1836 fois supérieure à celle de l'électron, le centre de masse du système se situe très proche du proton. Par conséquent, la masse réduite est presque équivalente à celle de l'électron, ce qui permet d'approximer le mouvement de ce dernier à une distance r du proton, tandis que ce dernier est supposé immobile. Cette approximation est couramment utilisée dans l'étude des atomes hydrogénoïdes.

Nous allons ainsi étudier les états liés d'une particule dans le champ Coulombien créé par le noyau. L'énergie potentielle du système est donnée par :

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (4.2)$$

L'Hamiltonien du système, qui gouverne le mouvement de la particule, s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(r). \quad (4.3)$$

Cet Hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps puisque le potentiel $V(r)$ est indépendant du temps. Par conséquent, la valeur moyenne de l'énergie est une constante du mouvement. Les états stationnaires du système sont caractérisés par une énergie E et une fonction d'onde $\psi(r)$, exprimée sous la forme :

$$\psi(r, t) = \varphi(r)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (4.4)$$

4.3 Atome Hydrogéoïde dans un Espace Non Commutatif

4.3.1 Potentiel Muonique dans un Espace Commutatif

Les atomes muoniques représentent une classe particulière d'atomes hydrogéoïdes. Ils se forment lorsqu'un muon – particule élémentaire de charge négative et de spin $1/2$, ayant une masse environ 207 fois supérieure à celle de l'électron – remplace l'électron dans un atome. Ces systèmes, appelés *atomes muoniques*, possèdent des propriétés uniques dues à la forte masse du muon.

Pour résoudre l'équation de Schrödinger appliquée à ces systèmes, nous introduisons un potentiel spécifique, dit de type muonique, défini comme suit [44, 74] :

$$V^c(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r} & \text{si } r > R, \\ -\frac{Ze^2}{2R} \left(3 - \frac{r^2}{R^2}\right) & \text{si } r < R, \end{cases} \quad (4.5)$$

En représentant l'hamiltonien total du système, sous la forme $\hat{H} = \hat{H}_0 + V^c(r)$, où

$$H_0 = -\frac{\hbar}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r}, \quad (4.6)$$

l'Hamiltonien d'un atome hydrogéoïde, \hat{H}_0 représente l'Hamiltonien non perturbé. Dans ce contexte, on assimile $V^c(r)$ à une perturbation. Le potentiel muonique (4.5) est reformulé de manière plus explicite [74] :

$$V^c(r) = \begin{cases} 0 & r > R \\ -\frac{Ze^2}{r} + \frac{Ze^2}{2R} \left(3 - \frac{r^2}{R^2}\right) & r < R \end{cases}. \quad (4.7)$$

Les fonctions propres de l'Hamiltonien non perturbé \hat{H}_0 sont bien connues. La fonction d'onde de l'état fondamental est donnée par

$$\psi_0(0) = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \quad (4.8)$$

où $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.35 \times 10^{-8}$ cm est le rayon de Bohr. L'énergie associée à cet état est :

$$E_0^{(0)} = -\frac{m_e (Ze^2)^2}{2\hbar^2} \quad (4.9)$$

Le déplacement d'énergie du niveau fondamental, dû à la non-ponctualité du noyau (traitée comme une perturbation), est calculé comme suit

$$\Delta E_0 = Ze^2 |\psi_0(r)|^2 \int_0^\infty \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{2r} + \frac{r^2}{3R} \right) 4\pi r^2 d^3r \quad (4.10)$$

Après résolution, on obtient :

$$\Delta E_0 = \frac{2\pi}{5} Ze^2 R^2 |\psi_0(r)|^2 \quad (4.11)$$

et finalement :

$$\Delta E_0 = \frac{2}{5} Z^4 \left(\frac{R}{a_0} \right)^2 \frac{e^2}{a_0} \quad (4.12)$$

Pour la correction énergétique relative, on a :

$$\left| \frac{E^{(1)}}{E^{(0)}} \right| = \frac{4}{5} Z^2 \left(\frac{R}{a_0} \right)^2 \approx (8 \times 10^{-10}) Z^{8/3} \quad (4.13)$$

4.3.2 Potentiels muoniques dans un espace non commutatif

Comme détaillé dans le chapitre précédent, la résolution de l'équation de Schrödinger dans un espace non commutatif, en présence d'un potentiel muonique, requiert l'utilisation de la transformation de Bopp (voir la relation (2.41)). En appliquant cette transformation au potentiel muonique initial (4.7), on obtient :

$$V^c(r) = \begin{cases} 0 & \text{pour } r > R, \\ \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{2R} \left(3 - \frac{r^2}{R^2} \right) & \text{pour } r < R, \end{cases} \quad (4.14)$$

ce qui conduit à la forme suivante :

$$V^{nc}(r) = \frac{Ze^2}{r} - \frac{3Ze^2}{2R} + \frac{Ze^2}{2R^3} r^2. \quad (4.15)$$

En substituant la relation (3.21),

$$r = \sqrt{\widehat{x}_i \widehat{x}_i}, \quad (4.16)$$

on reformule l'expression du potentiel non commutatif comme suit :

$$V^{nc}(r) = \frac{Ze^2}{\sqrt{\widehat{x}_i \widehat{x}_i}} - \frac{3Ze^2}{2R} + \frac{Ze^2}{2R^3} \widehat{x}_i \widehat{x}_i. \quad (4.17)$$

En explicitant \widehat{x}_i selon la transformation de Bopp, on obtient :

$$\begin{aligned} V^{nc}(r) &= \frac{Ze^2}{\sqrt{\left(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j\right) \left(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j\right)}} - \frac{3Ze^2}{2R} \\ &\quad + \frac{Ze^2}{2R^3} \left(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j\right) \left(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j\right) \\ &= \frac{Ze^2}{\sqrt{x_i x_i - \frac{x_i}{\hbar} \theta_{ij} \widehat{p}_j + \mathcal{O}(\theta^2)}} - \frac{3Ze^2}{2R} \\ &\quad + \frac{Ze^2}{2R^3} \left(x_i x_i + \frac{\theta_{ij}}{\hbar} \widehat{p}_j x_i + \mathcal{O}(\theta^2)\right). \end{aligned} \quad (4.18)$$

En développant au premier ordre en θ , nous obtenons :

$$\begin{aligned} V^{nc}(r) &= \frac{Ze^2}{r} \left(1 - \frac{1}{2r^2} \frac{\theta_{ij}}{\hbar} x_i \widehat{p}_j + \mathcal{O}(\theta^2)\right) - \frac{3Ze^2}{2R} \\ &\quad + \frac{Ze^2}{2R^3} \left(r^2 + \frac{\theta_{ij}}{\hbar} x_i \widehat{p}_j + \mathcal{O}(\theta^2)\right) \\ &= \frac{Ze^2}{r} - \frac{3Ze^2}{2R} + \frac{Ze^2}{2R^3} r^2 + \frac{Ze^2}{4\hbar r^3} \sum \epsilon_{ijk} \theta_k x_i \widehat{p}_j - \frac{Ze^2}{4\hbar R^3} \sum \epsilon_{ijk} \theta_k x_i \widehat{p}_j. \end{aligned} \quad (4.19)$$

En utilisant la convention de [6] pour θ_{ij} et le tenseur de Levi-Civita ϵ_{ijk} , et en appliquant l'identité suivante :

$$\sum \epsilon_{ijk} \theta_k x_i \widehat{p}_j = \vec{L} \cdot \vec{\theta}, \quad (4.20)$$

on peut réécrire le potentiel comme :

$$V^{nc}(r) = \frac{Ze^2}{r} - \frac{3Ze^2}{2R} + \frac{Ze^2}{2R^3} r^2 + \frac{Ze^2}{4\hbar} \vec{L} \cdot \vec{\theta} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{1}{R^3}\right). \quad (4.21)$$

Ainsi, il est possible d'exprimer :

$$V^{nc}(r) = V^c(r) + \frac{Ze^2}{4\hbar r^3} \vec{L} \cdot \vec{\theta}. \quad (4.22)$$

Le Hamiltonien dans l'espace non commutatif devient alors :

$$\begin{aligned} \hat{H} &= H_0 + V^{nc}(\hat{r}) \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V^c(r) + \frac{Ze^2}{4\hbar r^3} \vec{L} \cdot \vec{\theta} \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{3Ze^2}{2R} \left(\frac{r^2}{R} - 3 \right) + W, \end{aligned} \quad (4.23)$$

où nous avons posé :

$$W = \frac{Ze^2}{4\hbar r^3} \vec{L} \cdot \vec{\theta}. \quad (4.24)$$

L'équation de Schrödinger associée s'écrit alors :

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) = E\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi). \quad (4.25)$$

En substituant les expressions (4.14) et (4.23) dans (4.25), on obtient :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{r^2} \right) + \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{4\hbar} \vec{L} \cdot \vec{\theta} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{1}{R^3} \right) \right] \Psi = E\Psi. \quad (4.26)$$

Comme abordé au **chapitre 3**, cette équation peut être séparée en deux parties indépendantes : une partie radiale et une partie angulaire. Plus précisément, il est possible de trouver des solutions qui sont simultanément fonctions propres des opérateurs L^2 et L_z , avec des valeurs propres respectivement associées à la quantité de mouvement angulaire totale et à sa projection sur un axe donné.

La dépendance angulaire des solutions est décrite par les harmoniques sphériques $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, tandis que la partie radiale est représentée par une fonction $R_{nl}(r)$. Plus précisément, ces solutions peuvent être séparées en un produit d'une harmonique sphérique, qui dépend uniquement des coordonnées angulaires (θ, φ) et d'une fonction de r seule, notée $R_l(r)$ qui décrit la variation de l'onde en fonction de la distance radiale. Ce traitement permet de simplifier

l'équation et de résoudre la fonction d'onde en utilisant des méthodes analytiques.

Ainsi, la fonction d'onde complète s'exprime sous la forme :

$$\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (4.27)$$

De plus, ces solutions vérifient les relations de commutation et d'autovalues suivantes :

$$[\hat{H}, L_z] = 0, \quad (4.28)$$

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (4.29)$$

4.3.2.1 Etude de la Partie Angulaire

L'analyse de la composante angulaire pour les atomes hydrogénoïdes suit une approche identique à celle utilisée pour l'étude de la partie angulaire dans le cas classique de l'atome d'hydrogène. En effet, les propriétés fondamentales de symétrie sphérique et les solutions associées aux harmoniques sphériques restent inchangées, que ce soit pour un atome hydrogénoïde ou pour un atome d'hydrogène dans des conditions standards. Cela reflète la généralité des équations gouvernant le comportement angulaire des électrons dans un potentiel central, indépendamment de la nature spécifique du noyau atomique. Par conséquent, les résultats obtenus pour l'atome d'hydrogène dans le cadre ordinaire peuvent être directement appliqués aux systèmes hydrogénoïdes.

4.3.2.2 Etude de la Partie Radiale

En projetant la fonction harmonique sur l'équation (4.26) tout en insérant l'équation (4.27), nous obtenons

$$\left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[\frac{Ze^2}{2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3 \right) + \frac{Ze_l^2 m_l \theta_k}{4} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{1}{R^3} \right) - E \right] R_l(r) = 0, \quad (4.30)$$

qui peut être réécrite sous la forme simplifiée suivante

$$\frac{\partial}{\partial r} r - \frac{l(l+1)}{r^2} - r \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[\frac{Ze^2}{2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3 \right) + \frac{Ze^2 m_l \theta_k}{4} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{1}{R^3} \right) - E \right] R_l(r) = 0. \quad (4.31)$$

Pour simplifier l'analyse, introduisons une nouvelle fonction, définie par

$$U(r) = rR_l(r). \quad (4.32)$$

En utilisant cette substitution, l'équation devient

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) U(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3 \right) + \frac{Ze^2 m_l \theta_k}{4} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{1}{R^3} \right) - E \right) U(r) = 0. \quad (4.33)$$

La résolution de cette équation différentielle nécessite une analyse approfondie du comportement asymptotique de $U(r)$ pour différentes limites.

4.3.2.3 Comportement Asymptotique pour $r \rightarrow \infty$

Lorsque $r \rightarrow \infty$, les termes contenant $\frac{l(l+1)}{r^2}$ et $\frac{Ze^2 m_l \theta_k}{4r^3}$ deviennent négligeables, ce qui réduit (4.33) à

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} U(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3 \right) \frac{Ze^2 m_l \theta_k}{4R^3} - E \right) U(r) = 0. \quad (4.34)$$

Cela peut être reformulé comme suit :

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} U(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{2R} \left(3 - \frac{m_l \theta_k}{2R^2} \right) + E - \frac{Ze^2}{R^3} r^2 \right) U(r) = 0. \quad (4.35)$$

Posons les notations suivantes :

$$\begin{cases} E_\theta = \frac{Ze^2}{2R} \left(3 - \frac{m_l \theta_k}{2R^2} \right) + E \\ k = \frac{Ze^2}{R^3} \end{cases}. \quad (4.36)$$

L'équation devient alors :

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} U(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E_\theta - \frac{k}{2} r^2 \right) U(r) = 0. \quad (4.37)$$

En se basant sur les solutions classiques de l'oscillateur harmonique unidimensionnel, on

peut écrire :

$$\begin{cases} \alpha = \left(\frac{1}{2\mu}\right)^{1/4} \\ \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \end{cases} . \quad (4.38)$$

Ainsi, une solution générale, à un facteur de normalisation près, s'écrit :

$$U(r) = e^{-\frac{\alpha^2 r^2}{2}} H_n(\alpha r), \quad (4.39)$$

avec une énergie quantifiée donnée par :

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega, \quad (4.40)$$

où n est un entier positif ou nul, et H_n représente les polynômes d'Hermite.

4.3.2.4 Comportement asymptotique pour $r \rightarrow 0$

Dans la limite où $r \rightarrow 0$, l'équation différentielle (4.33) se réduit à

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} U(r) - \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2 m_l \theta_k}{4r^3} \right) U(r) = 0. \quad (4.41)$$

La solution générale de cette équation peut être exprimée à l'aide des fonctions de Bessel modifiées

$$U(r) = \frac{\sqrt{2}C_1 \hbar I_1 \left(\frac{e\sqrt{2\mu Z m_l \theta_k}}{\hbar} \sqrt{\frac{1}{r}} \right) + \sqrt{2}C_2 \hbar K_1 \left(\frac{e\sqrt{2\mu Z m_l \theta_k}}{\hbar} \sqrt{\frac{1}{r}} \right)}{e\sqrt{2\mu Z m_l \theta_k} \sqrt{\frac{1}{r}}}, \quad (4.42)$$

cette équation peut être simplifiée :

$$U(r) = C_1 \sqrt{\frac{r}{\theta_k m_l}} I_1 \left(2\sqrt{\frac{\mu Z e^2 m_l \theta_k}{\hbar^2 r}} \right) + C_2 \sqrt{\frac{r}{\theta_k m_l}} K_1 \left(2\sqrt{\frac{\mu Z e^2 m_l \theta_k}{\hbar^2 r}} \right) \quad (4.43)$$

Ici, C_1 et C_2 sont des constantes arbitraires, $I_1(x)$ est la fonction de Bessel modifiée de première espèce, et $K_1(x)$ est la fonction de Bessel modifiée de seconde espèce.

Les fonctions de Bessel modifiées de première espèce et d'ordre μ sont données par une série similaire à celle des fonctions de Bessel ordinaires de première espèce, sauf que tous les

coefficients de la série sont des nombres positifs

$$J_\nu(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m + \nu + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu} \quad (4.44)$$

En particulier, les fonctions de Bessel modifiées de première espèce et d'ordre 1 sont données par la série infinie suivante

$$I_1(x) = \frac{1}{2}x + \frac{x^3}{2^2 4} + \frac{x^5}{2^2 4^2 6} + \dots = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{1}{2}x\right)^{2m+1}}{(m+1)(m!)^2} \quad (4.45)$$

De manière similaire, les fonctions de Bessel modifiées de seconde espèce, d'ordre ν , sont définies par

$$K_\nu(x) = \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\nu}(x) - I_\nu(x)}{\sin(\nu\pi)}. \quad (4.46)$$

4.4 Atome d'Hélium en Espace Non-Commutatif

Comme nous l'avons vu dans les sections précédentes, la mécanique quantique offre une description précise des systèmes atomiques les plus simples : les atomes constitués d'un seul proton et d'un seul électron, ainsi que les atomes semblables à l'hydrogène et les éléments plus lourds qui ne contiennent également qu'un seul électron. Les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde peuvent être calculés par l'équation de Schrödinger, et la théorie des perturbations et la théorie des variations peuvent prédire les petits changements dans ces niveaux d'énergie dus aux interactions magnétiques dans l'atome. Nous allons maintenant étudier des atomes plus complexes, en particulier ceux qui possèdent plusieurs électrons. Nous allons commencer par étudier l'atome d'hélium, car c'est l'atome le plus simple après l'atome d'hydrogène. Il ne possède que deux électrons, et comme nous le montrerons, nous baserons notre étude en grande partie sur l'application des mêmes idées et concepts que ceux que nous avons appliqués précédemment.

L'atome d'hélium contient un noyau de charge $+2e$ et il est entouré de deux électrons portant une charge négative $-e$. Le noyau est situé à l'origine de notre système de coordon-

nées, et les vecteurs position des deux électrons sont respectivement notés r_1 et r_2 (Figure 4.1). En négligeant les spins des électrons et des nucléons, l'Hamiltonien du système prend alors la forme suivante

$$H = \frac{\mathbf{P}_1^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{P}_2^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (4.47)$$

Où :

- Les opérateurs \mathbf{P}_1 et \mathbf{P}_2 représentent les opérateurs de quantité de mouvement des deux électrons, respectivement. Ces opérateurs sont définis à partir des dérivées spatiales par rapport aux coordonnées de l'électron correspondant, $\mathbf{P}_1 = -i\hbar\nabla_1$, où $\nabla_1 = \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial y_1} + \frac{\partial}{\partial z_1}$. De manière similaire, l'opérateur \mathbf{P}_2 peut être défini en remplaçant les coordonnées de l'électron 1 par celles de l'électron 2,
- $\mathbf{r}_1 = |\vec{r}_1|$ et $\mathbf{r}_2 = |\vec{r}_2|$ sont les distances des électrons au noyau,
- $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ est la distance entre les deux électrons,
- 2 est le numéro atomique de l'hélium ($Z = 2$),
- ϵ_0 est la permittivité du vide,
- e est la charge de l'électron,
- m est la masse de l'électron.

Ensuite, la signification physique des différents termes du Hamiltonien de l'équation précédente est claire, les deux premiers termes représentent l'énergie cinétique des électrons, les deux suivants décrivent l'énergie d'interaction de chaque électron avec le potentiel central généré par le noyau de charge $Z = +2$ dans l'atome d'hélium (interaction électron-noyau), et le dernier terme correspond à l'énergie d'interaction entre les deux électrons (interaction électron-électron).

On cherche la solution de l'équation de Schrödinger

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (4.48)$$

où $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est la fonction d'onde de l'atome d'hélium qui dépend des coordonnées des deux

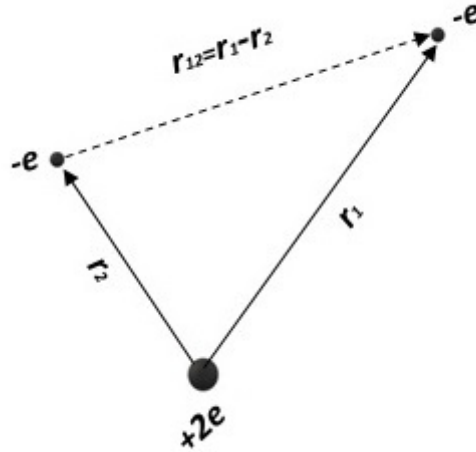


FIGURE 4.1 – L'atome d'hélium contient deux électrons aux positions r_1 et r_2 par rapport au noyau.

électrons. On peut écrire l'équation (4.47) comme suit

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (4.49)$$

alors

$$\hat{H} = \hat{H}_{Hy}(1) + \hat{H}_{Hy}(2) + \hat{H}_{Int} \quad (4.50)$$

où $\hat{H}_{Hy}(1)$ et $\hat{H}_{Hy}(2)$ est le Hamiltonien d'un atome d'hydrogène et $\hat{H}_{Int} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$ est le hamiltonien d'interaction qui décrit la répulsion entre les électrons.

Il est important de constater que, si le terme $\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$ était absent de \hat{H} , la solution de l'équation de Schrödinger deviendrait très simple. En effet, dans ce cas, les deux électrons seraient indépendants, et l'on aurait $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi(\mathbf{r}_1)\Psi(\mathbf{r}_2)$, avec une énergie totale donnée par $E = E_1 + E_2$, où $\Psi(\mathbf{r}_i)$ est la fonction d'onde de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène, $\Psi_{1s}(\mathbf{r})$, et E_1 et E_2 sont les énergies de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène pour $n = 1$. Ainsi, dans ce scénario simplifié, l'atome d'hélium ne serait rien d'autre que deux atomes d'hydrogène indépendants dans le cas d'un espace commutatif ou d'un espace non commutatif.

Revenons maintenant à l'équation (4.47). Bien que ce modèle semble relativement simple, il n'existe pas de solution analytique exacte pour l'atome d'hélium. Cette difficulté découle de

l'interaction entre les deux électrons, dont la prise en compte exige l'utilisation de méthodes d'approximation. Il est intéressant de noter que l'atome d'hélium a été l'un des premiers systèmes étudiés à l'aide de la méthode variationnelle.

Il en découle que, pour l'atome d'hélium, la fonction d'onde des deux électrons, en négligeant leur répulsion mutuelle, peut être approximée par le produit de deux fonctions d'onde hydrogénoïde. Cette approximation est particulièrement adaptée lorsque les deux électrons occupent la même orbitale, comme c'est le cas dans l'état fondamental de l'atome d'hélium. En effet, si l'on négligeait le terme de répulsion coulombienne entre les deux électrons, le Hamiltonien total H du système deviendrait séparable en deux Hamiltonien hydrogénoïde, chacun décrivant un électron évoluant indépendamment dans le champ coulombien créé par un noyau de charge $Z = 2$. Dans cette situation, la fonction d'onde exacte de l'état fondamental pourrait s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \langle \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2 | n_1 l_1 m_{l1}; n_2 l_2 m_{l2} \rangle = \langle \mathbf{r}_1 | n_1 l_1 m_{l1} \rangle \langle \mathbf{r}_2 | n_2 l_2 m_{l2} \rangle \\ &= \psi_{n_1 l_1 m_{l1}}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2 l_2 m_{l2}}(\mathbf{r}_2) \equiv \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2)\end{aligned}\quad (4.51)$$

où $\psi_{nlm_l}(\mathbf{r})$ est la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène avec une charge $Z = 2$ sur le noyau. Pour l'état fondamental, les deux électrons se trouvent dans l'état d'énergie le plus bas de l'atome d'hydrogène. Dans ce cas, la fonction d'onde non perturbée est donnée par [22, 75, 76, 77]

$$\langle \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2 | 100; 100 \rangle = \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{Z}{a_0}(r_1+r_2)} \quad (4.52)$$

Z est un paramètre libre à optimiser après l'évaluation de la valeur espérée de $\langle H \rangle$. Le résultat de ce calcul donne la valeur optimale de la charge électrique effective, tenant compte de la répulsion entre les électrons.

Selon le principe variationnel, Z peut être interprété comme une charge effective ajustable. Cette interprétation prend en compte l'effet protecteur qu'un électron exerce sur l'autre. En d'autres termes, chaque électron perçoit une charge effective légèrement inférieure à $Z = 2$, en raison de la répulsion coulombienne qui atténue l'attraction exercée par le noyau. Cette fonction d'onde correspond à un état propre de l'Hamiltonien « non perturbé » (où la répulsion

électronique est négligée), à condition que Z remplace 2 dans les termes coulombiens.

Pour intégrer cette propriété, nous devons réécrire l'Hamiltonien (4.47) en fonction du paramètre Z comme suit

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Z-2}{r_1} + \frac{Z-2}{r_2} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right), \quad (4.53)$$

celle-ci nous conduit à l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r_1} \right)}_{H_{1,Z}} + \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r_2} \right)}_{H_{2,Z}} + \\ & + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Soit

$$\hat{H} = H_{1,Z} + H_{2,Z} + R_1 + R_2 + I_{r_1,r_2}, \quad (4.55)$$

on pose

$$H_1 = H_{1,Z} + H_{2,Z} + R_1 + R_2, \quad (4.56)$$

$$H_{Int} = I_{r_1,r_2}. \quad (4.57)$$

Il est important de souligner que l'objectif de cette section est d'étudier l'atome d'hélium dans le contexte de l'espace non-commutatif. Pour ce faire, nous appliquons la transformation de Bopp-Shift définie par la relation (2.41) et tenons compte des modifications introduites par l'équation (2.53) dans l'équation (4.54), qui représente l'Hamiltonien du système. Cette formulation permet de prendre en compte les nouvelles propriétés géométriques et dynamiques induites par la non-commutativité, ouvrant ainsi la voie à une analyse approfondie des changements de propriétés de l'atome d'hélium.

Rappelle

Dans un espace non commutatif, les coordonnées et moments obéissent à la relation suivante

$$[\hat{r}_i, \hat{r}_j] = i\theta_{ij}, \quad [\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \quad (4.58)$$

Les coordonnées \widehat{r}_i sont corrigées par la relation de Bopp shift

$$\widehat{r}_i = r_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j, \quad \widehat{p}_i = p_i. \quad (4.59)$$

Le potentiel central pour une particule est donné par

$$-\frac{Ze^2}{|\vec{r}_i|}. \quad (4.60)$$

Après application de la relation de Bopp shift, $|\vec{r}_i|$ devient

$$|\widehat{r}_i| = \sqrt{r_i^2 - \frac{x_i \theta_{ij}}{\hbar} p_j + \mathcal{O}(\theta^2)}. \quad (4.61)$$

En développant au premier ordre en θ , nous obtenons

$$\frac{1}{|\widehat{r}_i|} = \frac{1}{r_i} + \frac{x_i \theta_{ij}}{2r_i^3} p_j + \mathcal{O}(\theta^2). \quad (4.62)$$

Ainsi, le terme de potentiel central corrigé devient :

$$-\frac{Ze^2}{|\widehat{r}_i|} = -\frac{Ze^2}{r_i} - \frac{Ze^2}{2\hbar r_i^3} x_i \theta_{ij} p_j + \mathcal{O}(\theta^2). \quad (4.63)$$

En faisant correspondre les équations (2.52) et (2.53), on obtient l'équation suivante :

$$V(r_i) = -\frac{Ze^2}{r_i} - \frac{Ze^2}{4\hbar^3} \frac{(\vec{L}_i \cdot \vec{\theta}_i)}{r_i^3} + \mathcal{O}(\theta^2). \quad (4.64)$$

Ainsi, lorsque nous appliquons la relation de Bopp-Shift aux positions r_1^2 et r_2^2 , la perturbation au premier ordre est la suivante

$$r_1^2 \rightarrow \left(r_1 - \frac{\theta_{1j}}{2\hbar} p_j \right)^2 = r_1^2 - \frac{\theta_{1j}}{\hbar} r_1 p_j + \mathcal{O}(\theta^2), \quad (4.65)$$

$$r_2^2 \rightarrow \left(r_2 - \frac{\theta_{2j}}{2\hbar} p_j \right)^2 = r_2^2 - \frac{\theta_{2j}}{\hbar} r_2 p_j + \mathcal{O}(\theta^2). \quad (4.66)$$

– Dans ce cadre, l'équation (4.56) s'écrit alors sous la forme suivante

$$\begin{aligned} \hat{H}_1^{NC} = & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{4\hbar} \frac{(\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1)}{r_1^3} \right) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_2} + \frac{1}{4\hbar} \frac{(\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2)}{r_2^3} \right) \right] \\ & + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{4\hbar} \frac{(\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1)}{r_1^3} \right) + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_2} + \frac{1}{4\hbar} \frac{(\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2)}{r_2^3} \right) \end{aligned} \quad (4.67)$$

⇒

$$\begin{aligned} \hat{H}_1^{NC} = & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} - \frac{Ze^2}{16\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1)}{r_1^3} \right) \\ & + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} - \frac{Ze^2}{16\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2)}{r_2^3} \right) \\ & + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} + (Z-2) \frac{e^2}{16\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1)}{r_1^3} \\ & + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} + (Z-2) \frac{e^2}{16\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2)}{r_2^3} \end{aligned} \quad (4.68)$$

⇒

$$\begin{aligned} \hat{H}_1^{NC} = & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} \right) \\ & + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} \\ & - \frac{Ze^2}{16\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1)}{r_1^3} - \frac{Ze^2}{16\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2)}{r_2^3} \\ & + (Z-2) \frac{e^2}{16\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1)}{r_1^3} + (Z-2) \frac{e^2}{16\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2)}{r_2^3}, \end{aligned} \quad (4.69)$$

⇒

$$\begin{aligned} \hat{H}_1^{NC} = & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} \right) \\ & + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} \\ & - \frac{e^2}{8\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1)}{r_1^3} - \frac{e^2}{8\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2)}{r_2^3}, \end{aligned} \quad (4.70)$$

et de celui-ci

$$\hat{H}_1^{NC} = \hat{H}_1^C - \frac{e^2}{8\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1)}{r_1^3} - \frac{e^2}{8\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2)}{r_2^3}. \quad (4.71)$$

– Passons maintenant à la relation (4.57). Nous examinons la relation du potentiel $\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$. Cette relation peut être exprimée comme

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{\frac{1}{2}}}. \quad (4.72)$$

Nous effectuons donc une expansion perturbée de la racine carrée du potentiel. En utilisant les relations de Pope-Shift (4.65) et (4.66), nous obtenons

$$r_1^2 + r_2^2 = r_1^2 + r_2^2 - \frac{\theta_{1j}}{\hbar} p_j r_1 - \frac{\theta_{2j}}{\hbar} p_j r_2 + \mathcal{O}(\theta^2). \quad (4.73)$$

Pour le terme croisé $-2r_1r_2 \cos \theta$, appliquons également la relation de Bopp shift, la correction au premier ordre est

$$\begin{aligned} -2r_1r_2 \cos \theta &= -2 \left(r_1 - \frac{\theta_{1j}}{2\hbar} p_j \right) \left(r_2 - \frac{\theta_{2j}}{2\hbar} p_j \right) \cos \theta \\ &= 2r_1r_2 \cos \theta - \frac{\theta_{1j}}{\hbar} r_2 p_j \cos \theta - \frac{\theta_{2j}}{\hbar} r_1 p_j \cos \theta + \mathcal{O}(\theta^2). \end{aligned} \quad (4.74)$$

L'expression pour $\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$ inclut les corrections dues à la non-commutativité

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta - \epsilon)^{\frac{1}{2}}} + \mathcal{O}(\theta) \quad (4.75)$$

où

$$\epsilon = \left(r_1 p_j + \frac{1}{2} r_2 p_j \cos \theta \right) \frac{\theta_{1j}}{\hbar} + \left(r_2 p_j + \frac{1}{2} r_1 p_j \cos \theta \right) \frac{\theta_{2j}}{\hbar} \quad (4.76)$$

Ce résultat représente l'expansion perturbative de l'inverse de la distance entre deux électrons dans la noyau, tenant compte du décalage Bopp shift jusqu'au premier ordre en θ_{ij} . Les termes impliquant p_j et θ_{ij} proviennent des positions modifiées des particules dans l'espace non commutatif.

En faisant correspondre les équations (2.56) et (2.46), le terme de perturbation ϵ devient :

$$\begin{aligned} \epsilon &= r_1 p_j \frac{\theta_{1j}}{\hbar} + \frac{1}{2} r_2 p_j \frac{\theta_{1j}}{\hbar} \cos \theta + r_2 p_j \frac{\theta_{2j}}{\hbar} + \frac{1}{2} r_1 p_j \frac{\theta_{2j}}{\hbar} \cos \theta, \\ \epsilon &= \frac{1}{\hbar} \left(\frac{1}{2} \sum \varepsilon_{jki} r_1 p_j \theta_{1j} + \frac{1}{2} \sum \varepsilon_{jki} r_2 p_j \theta_{2j} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2\hbar} \left(\frac{1}{2} \sum \varepsilon_{jki} r_2 p_j \theta_{1j} + \frac{1}{2} \sum \varepsilon_{jki} r_1 p_j \theta_{2j} \right) \cos \theta, \end{aligned} \quad (4.77)$$

on obtient l'équation

$$\epsilon = \frac{1}{2\hbar} \left(\vec{L}_1 \vec{\theta}_1 + \vec{L}_2 \vec{\theta}_2 \right) + \frac{1}{4\hbar} \left(\vec{L}_1 \vec{\theta}_2 + \vec{L}_2 \vec{\theta}_1 \right) \cos \theta. \quad (4.78)$$

On utilise l'approximation perturbative pour développer la racine carrée, lorsque $\epsilon \ll 1$, donc

$$(A + \epsilon_1)^{-1/2} \approx A^{-1/2} - \frac{\epsilon_1}{2A^{3/2}}, \quad (4.79)$$

où

$$A = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta, \quad \epsilon_1 = -\epsilon. \quad (4.80)$$

Ainsi, l'équation

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \approx \frac{1}{\sqrt{A}} + \frac{\epsilon}{2A^{3/2}} + \mathcal{O}(\theta^2). \quad (4.81)$$

Le potentiel (4.72) devient alors

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} &= \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta}} \\ &+ \frac{\left(\vec{L}_1 \vec{\theta}_1 + \vec{L}_2 \vec{\theta}_2 \right) + \frac{1}{2} \left(\vec{L}_1 \vec{\theta}_2 + \vec{L}_2 \vec{\theta}_1 \right) \cos \theta}{4\hbar (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \\ &+ \mathcal{O}(\theta^2). \end{aligned} \quad (4.82)$$

$$= I_{int} + I_{int}^{NC} \quad (4.83)$$

On peut donc écrire l'opérateur hamiltonien (4.54) de l'atome d'hélium dans l'espace NC comme suit

$$\begin{aligned} \hat{H}^{NC} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right) \\ &+ (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \\ &- \frac{e^2}{8\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1)}{r_1^3} - \frac{e^2}{8\pi\hbar\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2)}{r_2^3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta}} \\ &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\left(\vec{L}_1 \vec{\theta}_1 + \vec{L}_2 \vec{\theta}_2 \right) + \frac{1}{2} \left(\vec{L}_1 \vec{\theta}_2 + \vec{L}_2 \vec{\theta}_1 \right) \cos \theta}{\hbar (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} + \mathcal{O}(\theta^2). \end{aligned} \quad (4.84)$$

⇒

$$\begin{aligned}
 \hat{H}^{NC} = & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} \right) \\
 & + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta}} \\
 & + \frac{e^2(\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1)}{4\pi\hbar\epsilon_0} \left(-\frac{1}{2r_1^3} + \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \right) \\
 & + \frac{e^2(\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2)}{4\pi\hbar\epsilon_0} \left(-\frac{1}{2r_2^3} + \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \right) \\
 & + \frac{e^2}{8\hbar\pi\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_1 \vec{\theta}_2 + \vec{L}_2 \vec{\theta}_1) \cos \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} + \mathcal{O}(\theta^2). \tag{4.85}
 \end{aligned}$$

Nous pouvons observer que l'Hamiltonien précédent (4.85) se décompose en la somme de deux Hamiltoniens, l'un dans l'espace commutatif et l'autre dans l'espace non commutatif, comme indiqué ci-dessous

$$\hat{H}^{NC} = \hat{H}_c + \hat{H}_{nc} \tag{4.86}$$

où :

$$\hat{H}_c = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} \right) \tag{4.87}$$

$$+ (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} + (Z-2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta}} \tag{4.88}$$

et

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{nc} = & \frac{e^2(\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1)}{4\pi\hbar\epsilon_0} \left(-\frac{1}{2r_1^3} + \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \right) \\
 & + \frac{e^2(\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2)}{4\pi\hbar\epsilon_0} \left(-\frac{1}{2r_2^3} + \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \right) \\
 & + \frac{e^2}{8\hbar\pi\epsilon_0} \frac{(\vec{L}_1 \vec{\theta}_2 + \vec{L}_2 \vec{\theta}_1) \cos \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} + \mathcal{O}(\theta^2). \tag{4.89}
 \end{aligned}$$

Il est remarquable que l'Hamiltonien non commutatif \hat{H}_{nc} se compose de trois termes. Les premier et deuxième termes représentent l'effet de la non-commutativité θ_{ij} de l'atome d'hélium à l'intérieur du noyau pour chaque électron séparément, c'est-à-dire l'effet de l'espace

non commutatif pour chaque électron indépendamment l'un de l'autre, tandis que le troisième terme représente l'effet de l'interaction entre l'espace non commutatif du premier électron sur deuxième électron, et inversement. Cette interaction est maintenue par l'angle θ entre les deux électrons. C'est comme si l'espace non commutatif était divisé en deux parties, θ_1 pour le premier électron et θ_2 pour le second, et l'interaction se produit alors entre le deuxième espace du premier électron et le premier espace du deuxième électron.

Comme une lecture théorique de ce qui se passe à l'intérieur du noyau d'un atome d'hélium, si nous voulons généraliser, c'est comme si, dans le microcosme, l'effet non commutatif était divisé à l'intérieur du noyau, où le nombre d'espaces non commutatifs est associé au nombre d'électrons à l'intérieur du noyau, et où chaque électron possède son propre espace non commutatif.

Par conséquent, si nous utilisons ce résultat et la fonction d'onde d'essai (4.52), la valeur attendue de l'hamiltonien (4.85) dans l'espace non commutatif est la suivante

$$\langle \hat{H}^{NC} \rangle = \langle \hat{H}_c \rangle + \langle \hat{H}_{nc} \rangle \quad (4.90)$$

$$= E_0 + E_{int}^1 \quad (4.91)$$

Le premier terme de la dernière équation correspond à l'énergie d'un atome d'hélium ordinaire [78, 22, 75, 76, 77], donnée comme suit

$$E_0 = \langle \hat{H}_c \rangle = \left(-2Z^2 + \frac{27}{4} \right) W_H, \quad (4.92)$$

où $W_H = 13.6 \text{ eV}$

Nous devons maintenant évaluer le deuxième terme de l'équation précédente

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{H}_{nc} \rangle &= \left\langle \frac{e^2(\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1)}{4\pi\hbar\varepsilon_0} \left(-\frac{1}{2r_1^3} + \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \right) \right\rangle \\
 &+ \left\langle \frac{e^2(\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2)}{4\pi\hbar\varepsilon_0} \left(-\frac{1}{2r_2^3} + \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \right) \right\rangle \\
 &+ \left\langle \frac{e^2}{8\hbar\pi\varepsilon_0} \frac{(\vec{L}_1 \vec{\theta}_2 + \vec{L}_2 \vec{\theta}_1) \cos \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \right\rangle + \mathcal{O}(\theta^2), \tag{4.93}
 \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{H}_{nc} \rangle &= \frac{e^2}{4\pi\hbar\varepsilon_0} \left[-\left\langle \frac{\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1}{2r_1^3} \right\rangle + \left\langle \frac{\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \right\rangle \right] \\
 &+ \frac{e^2}{4\pi\hbar\varepsilon_0} \left[-\left\langle \frac{\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2}{2r_2^3} \right\rangle + \left\langle \frac{\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \right\rangle \right] \\
 &+ \frac{e^2}{8\hbar\pi\varepsilon_0} \left\langle \frac{\vec{L}_1 \vec{\theta}_2}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \cos \theta \right\rangle \\
 &+ \frac{e^2}{8\hbar\pi\varepsilon_0} \left\langle \frac{\vec{L}_2 \vec{\theta}_1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \cos \theta \right\rangle + \mathcal{O}(\theta^2), \tag{4.94}
 \end{aligned}$$

on trouve

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{H}_{nc} \rangle &= -\frac{e^2}{8\pi\hbar\varepsilon_0} \left(\langle \psi(\vec{r}_1) | \frac{\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1}{r_1^3} | \psi(\vec{r}_1) \rangle - \langle \psi(\vec{r}_2) | \frac{\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2}{r_2^3} | \psi(\vec{r}_2) \rangle \right) \\
 &+ \frac{e^2}{4\pi\hbar\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \\
 &+ \frac{e^2}{4\pi\hbar\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \\
 &+ \frac{e^2}{8\hbar\pi\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{\vec{L}_1 \vec{\theta}_2 \cos \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \\
 &+ \frac{e^2}{8\hbar\pi\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{\vec{L}_2 \vec{\theta}_1 \cos \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle + \mathcal{O}(\theta^2). \tag{4.95}
 \end{aligned}$$

Nous allons résoudre l'équation ci-dessus terme par terme, en utilisant les résultats du chapitre 3.

– Les valeurs du premier et du deuxième terme sont égales, seule la différence se situant

en $\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1$ et $\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2$.

$$\langle \hat{H}_{nc1} \rangle = \frac{e^2}{8\pi\hbar\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1) | \frac{\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1}{2r_1^3} | \psi(\vec{r}_1) \rangle = \frac{e^2}{8\pi\hbar\varepsilon_0} \frac{m_{l_1} \theta_1 Z^3}{a_0^3}, \quad (4.96)$$

$$\langle \hat{H}_{nc2} \rangle = \frac{e^2}{8\pi\hbar\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_2) | \frac{\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2}{r_2^3} | \psi(\vec{r}_2) \rangle = \frac{e^2}{8\pi\hbar\varepsilon_0} \frac{m_{l_2} \theta_2 Z^3}{a_0^3}. \quad (4.97)$$

– Le troisième et quatrième termes sont égaux, avec la même différence que précédemment :

$$\langle \hat{H}_{nc3} \rangle = \frac{e^2}{4\pi\hbar\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{\vec{L}_1 \cdot \vec{\theta}_1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle, \quad (4.98)$$

$$\langle \hat{H}_{nc4} \rangle = \frac{e^2}{4\pi\hbar\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle, \quad (4.99)$$

\Rightarrow

$$\langle \hat{H}_{nc3} \rangle = \frac{e^2 m_{l_1} \theta_1}{4\pi\hbar\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle, \quad (4.100)$$

$$\langle \hat{H}_{nc4} \rangle = \frac{e^2 m_{l_2} \theta_2}{4\pi\hbar\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{\vec{L}_2 \cdot \vec{\theta}_2}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle. \quad (4.101)$$

en effet, nous devons calculer l'intégrale suivante

$$I = \int \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 \quad (4.102)$$

Nous remplaçons la fonction d'onde $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ par les fonctions d'onde stationnaires (4.52)

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1)\psi(\vec{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{Z}{a_0} r_1} \times \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{Z}{a_0} r_2}. \quad (4.103)$$

en tenant compte que

$$\langle \psi(\vec{r}_1) | \psi(\vec{r}_1) \rangle = \langle \psi(\vec{r}_2) | \psi(\vec{r}_2) \rangle = 1 \quad (4.104)$$

Nous substituons cela dans l'intégrale, ce qui donne

$$I = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\pi \frac{Z^6}{\pi^2 a_0^6} e^{-\frac{2Z}{a_0}(r_1+r_2)} \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta)^{3/2}} d^3r_1 d^3r_2. \quad (4.105)$$

Les éléments de volume en coordonnées sphériques sont donnés par

$$d^3r_1 = r_1^2 \sin \theta_1 dr_1 d\theta_1 d\phi_1, \quad d^3r_2 = r_2^2 \sin \theta_2 dr_2 d\theta_2 d\phi_2. \quad (4.106)$$

D'une part, la symétrie sphérique, et d'autre part, l'intégrale en fonction de ϕ ne dépend pas de cette dernière, ce qui nous donne simplement un facteur 2π . D'où

$$I = \frac{2Z^6}{\pi^2 a_0^6} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\pi e^{-\frac{2Z}{a_0}(r_1+r_2)} \frac{\sin \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{3/2}} r_1^2 r_2^2 d\theta dr_1 dr_2. \quad (4.107)$$

Nous allons maintenant effectuer l'intégration sur θ . Nous pouvons utiliser la substitution $x = \cos \theta$, ce qui donne $dx = -\sin \theta d\theta$. L'intégrale devient alors

$$I = \frac{2Z^6}{\pi a_0^6} \int_0^\infty \int_0^\infty r_1^2 r_2^2 e^{-\frac{2Z}{a_0}(r_1+r_2)} \int_{-1}^1 \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 x)^{3/2}} dx dr_1 dr_2. \quad (4.108)$$

L'intégrale angulaire $\int_{-1}^1 \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 x)^{3/2}} dx$ peut être résolue analytiquement en utilisant des techniques d'intégration standard. Le résultat de cette intégrale est donné par

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 x)^{3/2}} dx = \frac{2}{r_1 r_2 (r_1^2 + r_2^2)}. \quad (4.109)$$

En remplaçant cette expression dans l'intégrale (4.108), nous obtenons

$$I = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2Z^6}{\pi a_0^6} r_1^2 r_2^2 e^{-\frac{2Z}{a_0}(r_1+r_2)} \cdot \frac{2}{r_1 r_2 (r_1^2 + r_2^2)} dr_1 dr_2. \quad (4.110)$$

En simplifiant les termes constants et les puissances de r_1 et r_2 , nous obtenons

$$I = \frac{4Z^6}{\pi a_0^6} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{1}{r_1 r_2 (r_1^2 + r_2^2)} e^{-\frac{2Z}{a_0}(r_1+r_2)} dr_1 dr_2. \quad (4.111)$$

En factorisant les termes constants, nous avons

$$I = \frac{4Z^6}{\pi a_0^6} \int_0^\infty \frac{1}{r_1} e^{-\frac{2Z}{a_0} r_1} \left[\int_0^\infty \frac{1}{r_2 (r_1^2 + r_2^2)} e^{-\frac{2Z}{a_0} r_2} dr_2 \right] dr_1. \quad (4.112)$$

Nous devons maintenant résoudre l'intégrale interne

$$I_2(r_1) = \int_0^\infty \frac{1}{r_2 (r_1^2 + r_2^2)} e^{-\frac{2Z}{a_0} r_2} dr_2. \quad (4.113)$$

Utilisons une substitution trigonométrique pour cette intégrale. Posons $r_2 = r_1 \tan \theta$, alors $dr_2 = r_1 \sec^2 \theta d\theta$, et $r_1^2 + r_2^2 = r_1^2 \sec^2 \theta$.

$$I = \frac{4Z^6}{\pi a_0^6} \int_0^\infty \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{r_1^3} \frac{1}{\tan \theta} e^{-\frac{2Z}{a_0} r_1 (1 + \tan \theta)} d\theta dr_1. \quad (4.114)$$

Nous utilisons une méthode de développement asymptotique et de calcul évaluée numériquement. Nous simplifions, ce qui nous permet de trouver une solution approchée suivante

$$I = \frac{Z^4}{a_0^4}. \quad (4.115)$$

Par conséquent, les troisième et quatrième termes de l'équation (4.95) devient

$$\langle \hat{H}_{nc3} \rangle = \frac{e^2 m_{l_1} \theta_1 Z^4}{4\varepsilon_0 \pi \hbar a_0^4} ; \quad \langle \hat{H}_{nc4} \rangle = \frac{e^2 m_{l_2} \theta_2 Z^4}{4\varepsilon_0 \pi \hbar a_0^4}. \quad (4.116)$$

– En suivant la même méthode que précédemment, nous calculons les quatrième et cinquième termes de l'équation (4.95).

$$\langle \hat{H}_{nc5} \rangle = + \frac{e^2}{8\hbar\pi\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{\vec{L}_1 \vec{\theta}_2 \cos \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{3/2}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (4.117)$$

$$\langle \hat{H}_{nc6} \rangle = + \frac{e^2}{8\hbar\pi\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{\vec{L}_2 \vec{\theta}_1 \cos \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{3/2}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle + \mathcal{O}(\theta^2), \quad (4.118)$$

\Rightarrow

$$\langle \hat{H}_{nc5} \rangle = + \frac{e^2 m_{l_1} \theta_2}{8\hbar\pi\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{\cos \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{3/2}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (4.119)$$

$$\langle \hat{H}_{nc6} \rangle = + \frac{e^2 m_{l_2} \theta_1}{8\hbar\pi\varepsilon_0} \langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{\cos \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{3/2}} | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle + \mathcal{O}(\theta^2). \quad (4.120)$$

En effet, calculons l'intégrale suivante :

$$I = \int \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{\cos \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{3/2}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (4.121)$$

\Rightarrow

$$I = \int \int \frac{Z^6}{\pi^2 a_0^6} e^{-\frac{2Z}{a_0}(r_1+r_2)} \frac{\cos \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{3/2}} d^3 r_1 d^3 r_2. \quad (4.122)$$

Passons maintenant aux coordonnées sphériques, $d^3 r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$, et l'intégrale devient

$$I = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{Z^6}{\pi^2 a_0^6} r_1^2 r_2^2 e^{-\frac{2Z}{a_0}(r_1+r_2)} \frac{\cos \theta \sin \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{3/2}} d\phi d\theta dr_1 dr_2. \quad (4.123)$$

Le terme $\frac{\cos \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{3/2}}$ ne dépend pas de ϕ . L'intégrale sur ϕ donne un facteur 2π , et l'intégrale devient :

$$I = \frac{2Z^6}{\pi a_0^6} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\pi r_1^2 r_2^2 e^{-\frac{2Z}{a_0}(r_1+r_2)} \frac{\cos \theta \sin \theta}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{3/2}} d\theta dr_1 dr_2. \quad (4.124)$$

Nous faisons un changement de variable avec $x = \cos \theta$, ce qui donne $dx = -\sin \theta d\theta$, et les bornes de l'intégrale deviennent $x \in [-1, 1]$. L'intégrale devient alors :

$$I = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2Z^6}{\pi a_0^6} r_1^2 r_2^2 e^{-\frac{2Z}{a_0}(r_1+r_2)} \int_{-1}^1 \frac{x}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 x)^{3/2}} dx dr_1 dr_2. \quad (4.125)$$

Pour résoudre l'intégrale $\int_{-1}^1 \frac{x}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 x)^{3/2}} dx$ en posant $a = r_1^2 + r_2^2$ et $b = 2r_1 r_2$

$$\int_{-1}^1 \frac{x}{(a - bx)^{3/2}} dx = \frac{2 [2a (\sqrt{a-b} - \sqrt{a+b}) + b (\sqrt{a-b} + \sqrt{a+b})]}{b^2 \sqrt{(a-b)(a+b)}} \quad (4.126)$$

Nous obtenons

$$\int_{-1}^1 \frac{x}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 x)^{3/2}} dx = \frac{2r_2(r_1^2 - r_1 - r_2)}{(r_1^2 - r_2^2)}. \quad (4.127)$$

Nous substituons la valeur de l'intégrale angulaire dans I , ce qui donne

$$I = \frac{8Z^6}{\pi a_0^6} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{r_2(r_1^2 - r_1 - r_2)}{(r_1^2 - r_2^2)} e^{-\frac{2Z}{a_0}(r_1+r_2)} dr_1 dr_2. \quad (4.128)$$

En utilisant l'approximation des systèmes atomiques, dans le cas d'un atome d'hélium, nous pouvons traiter les intégrales comme des intégrales de type e^{-r} , ce qui nous donne une solution approximative.

$$I = \frac{Z^6}{2\pi a_0^6} \left(\frac{\pi a_0}{2Z} \right)^2 = \frac{Z^4}{8a_0^4}. \quad (4.129)$$

Par conséquent, le quatrième et le cinquième terme de l'équation (4.95). deviennent

$$\langle \hat{H}_{nc5} \rangle = + \frac{e^2 Z^4 m_{l_1} \theta_2}{64 \hbar \pi a_0^4 \varepsilon_0} ; \quad \langle \hat{H}_{nc6} \rangle = + \frac{e^2 Z^4 m_{l_2} \theta_1}{64 \hbar \pi a_0^4 \varepsilon_0}. \quad (4.130)$$

Finalement, on déduit alors la correction de l'énergie pour le noyau de hélium dans le cadre de la théorie non commutative, la correction est donnée par

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_{nc} \rangle &= E_{int}^1 = - \frac{e^2 m_{l_1} \theta_1 Z^3}{8 \pi \hbar \varepsilon_0 a_0^3} - \frac{e^2 m_{l_2} \theta_2 Z^3}{8 \pi \hbar \varepsilon_0 a_0^3} + \frac{e^2 m_{l_1} \theta_1 Z^4}{4 \varepsilon_0 \pi \hbar a_0^4} + \frac{e^2 m_{l_2} \theta_2 Z^4}{4 \varepsilon_0 \pi \hbar a_0^4} + \frac{e^2 Z^4 m_{l_1} \theta_2}{64 \hbar \pi a_0^4 \varepsilon_0} + \frac{e^2 Z^4 m_{l_2} \theta_1}{64 \hbar \pi a_0^4 \varepsilon_0} \\ &\Rightarrow \\ E_{int}^1 &= \frac{e^2 Z^3}{4 \pi \hbar \varepsilon_0 a_0^3} \left(\frac{Z}{a_0} - \frac{1}{2} \right) (m_{l_1} \theta_1 + m_{l_2} \theta_2) + \frac{e^2 Z^4}{64 \hbar \pi a_0^4 \varepsilon_0} (m_{l_1} \theta_2 + m_{l_2} \theta_1) + \mathcal{O}(\theta^2) \end{aligned} \quad (4.131)$$

Comme nous l'avons dit précédemment, dans la dernière équation, le premier terme est la somme de l'effet de l'espace non commutatif de l'atome d'hélium, tandis que le dernier terme est la somme de l'effet de l'interaction entre les deux espaces non commutatifs des deux électrons l'un par rapport à l'autre dans le noyau d'hélium. Notons que, puisque θ tend vers zéro, l'équation (4.85) donne l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hélium.

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

Chapitre 5

Conclusion Générale

Cette thèse porte sur l'étude approfondie de la théorie quantique dans un espace non commutatif, dans l'optique d'explorer et de résoudre l'équation de Schrödinger en présence de potentiels stationnaires. L'objectif principal est de comprendre les implications de la non commutativité de l'espace sur les propriétés fondamentales des systèmes quantiques et de déterminer les corrections énergétiques résultantes dans un cadre géométrique déformé

Dans un premier temps, nous avons examiné l'algèbre des commutateurs, base de la géométrie non commutative, et montré en quoi elle étend le cadre de la mécanique quantique classique vers une description non commutative de l'espace. Cette géométrie est construite à partir d'une relation de commutation entre les coordonnées spatiales, caractérisée par un paramètre de non commutativité, θ , qui induit des modifications dans les règles de commutation des opérateurs de position et d'impulsion.

Pour formaliser la non commutativité, nous avons présenté deux méthodes fondamentales. La première repose sur le produit star, ou produit de Moyal, obtenu en utilisant les opérateurs de Weyl pour déformer le produit standard. Cette méthode permet d'incorporer la non commutativité directement dans les relations d'opérateurs, ce qui modifie les calculs sans nécessiter de changement explicite de coordonnées. La seconde méthode implique l'utilisation du décalage de Bopp. Ce décalage, exprimé en fonction du paramètre θ et des coordonnées spatiales et d'impulsion, prend la forme suivante : $\hat{x}_i = x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_j$, et permet de traduire les coordonnées d'un espace classique en coordonnées d'un espace non commutatif. Le décalage de

Bopp est ainsi une approche puissante pour établir une équivalence entre les coordonnées de l'espace classique et celles de l'espace non commutatif, permettant d'appliquer les outils de la mécanique quantique ordinaire dans un contexte non commutatif.

Dans la suite de notre étude, nous avons appliqué ce formalisme pour résoudre l'équation de Schrödinger associée au potentiel de Kratzer dans l'espace non commutatif. Ici, la non commutativité de l'espace est introduite comme une perturbation indépendante du temps. Elle conduit à un décalage du vecteur de position, x_i vers un vecteur modifié \hat{x}_i , selon la relation de décalage de Bopp. Les calculs ont permis de déterminer les corrections d'énergie jusqu'au second ordre en fonction du paramètre non commutatif θ , ce qui nous a permis d'obtenir le spectre énergétique modifié du potentiel de Kratzer dans cet espace.

Enfin, dans le quatrième chapitre, nous avons étudié la résolution de l'équation de Schrödinger pour des systèmes d'atomes hydrogénéoïdes muoniques dans un cadre non commutatif. Ces systèmes, constitués de particules lourdes telles que le muon en orbite autour d'un noyau, sont particulièrement sensibles aux effets de la non commutativité en raison de leur structure atomique compacte. Nous avons observé que le comportement asymptotique de l'atome hydrogénéoïde loin du noyau présente des similitudes marquées avec celui d'un oscillateur harmonique.

Parallèlement, notre étude de l'atome d'hélium dans un espace commutatif a conduit à un résultat à la fois intrigant et scientifiquement intéressant. En appliquant la relation de Bopp Shift au noyau d'hélium, nous avons constaté qu'en plus de l'espace non commutatif généralement attendu dans ce contexte, les électrons de l'atome d'hélium génèrent deux espaces non commutatifs distincts pour chacun d'eux. Ces espaces interagissent entre eux, formant un système complexe qui mérite une analyse approfondie. Ce phénomène ouvre de nouvelles perspectives et mérite une exploration approfondie de la part des chercheurs.

Bibliographie

- [1] Alain CONNES. *Noncommutative Geometry*. Springer, 1994.
- [2] Sergio DOPLICHER, Klaus FREDENHAGEN et John E. ROBERTS. « The Quantum Structure of Spacetime at the Planck Scale and Quantum Fields ». In : *Communications in Mathematical Physics* 172 (1995), p. 187-220.
- [3] Hartland S. SNYDER. « Quantized Space-Time ». In : *Physical Review* (1947).
- [4] Nathan SEIBERG et Edward WITTEN. « String Theory and Noncommutative Geometry ». In : *Journal of High Energy Physics* 1999.09 (1999), p. 032.
- [5] Richard J. SZABO. « Quantum Field Theory on Noncommutative Spaces ». In : *Physics Reports* 378.4 (2003), p. 207-299.
- [6] Masud CHAICHIAN, M. M. SHEIKH-JABBARI et A. TUREANU. « Hydrogen Atom Spectrum and the Lamb Shift in Noncommutative QED ». In : *Physical Review Letters* 86.13 (2001), p. 2716.
- [7] V. P. NAIR et A. P. POLYCHRONAKOS. « Quantum Mechanics on the Noncommutative Plane and Sphere ». In : *Physics Letters B* 505.1-4 (2001), p. 267-274.
- [8] Claude ASLANGUL. *Mécanique Quantique 2 : Développements et Application à Basse Énergie*. De Boeck Supérieur, 2015.
- [9] Khalissa LIBARIR. « Sur la Structure des États Quantiques via les Approches des Perturbations et des Variations ». Thèse de doct. Université de Biskra, 2018.
- [10] Claude ASLANGUL. *Applications de la Mécanique Quantique*. École Normale Supérieure, 2005.
- [11] Jean-Louis BASDEVANT. *Lectures on Quantum Mechanics : With Problems, Exercises and Solutions*. Springer, 2023.
- [12] Claude COHEN-TANNOUJJI, Bernard DIU et Franck LALOË. *Quantum Mechanics, Volume 1 : Basic Concepts, Tools, and Applications*. Wiley, 2019.
- [13] Michel LE BELLAC. *Physique Quantique - Fondements Tome 1 : Fondements*. EDP Sciences, 2013.
- [14] Claude ASLANGUL. *Mécanique Quantique 1 : Fondements et Premières Applications*. De Boeck Supérieur, 2018.

-
- [15] Habib BOUCHRIHA. *Introduction à la Physique Quantique*. 2002.
- [16] Albert MESSIAH. *Mécanique Quantique. Tome 1*. Walter de Gruyter GmbH & Co KG, 2020.
- [17] Frédéric MILA. « Notes de Cours : Physique Quantique I et II ». École Polytechnique Fédérale de Lausanne. 2010.
- [18] Claude COHEN-TANNOUJI, Bernard DIU et Franck LALOË. *Mécanique Quantique - Tome 2*. 2020.
- [19] Ruth DURRER. « Mécanique Quantique II ». Notes de cours, Université de Genève. 2007.
- [20] Daniel Jean BAYE. « Mécanique Quantique Première Partie Notions de Base ». Université Libre de Bruxelles. 2007.
- [21] Gennaro AULETTA, Mauro FORTUNATO et Giorgio PARISI. *Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2009.
- [22] Nouredine ZETTLI. *Quantum Mechanics : Concepts and Applications*. John Wiley & Sons, 2009.
- [23] Alain CONNES. « Non-Commutative Differential Geometry ». In : *Publications Mathématiques de l'IHÉS* 62 (1985), p. 41-144.
- [24] Alain CONNES. « Geometry from the Point of View of Noncommutative Spaces ». In : *Mathematical Physics and Quantum Field Theory*. Sous la dir. de R. PENROSE et M. ATIYAH. Springer, 1998, p. 153-174.
- [25] Alain CONNES. « The Spectral Action Principle ». In : *Noncommutative Geometry and Physics : Renormalisation, Symmetries and Spectral Methods*. Sous la dir. d'Alain CONNES. Springer, 2006, p. 321-329.
- [26] Alain CONNES. « Noncommutative Geometry Year 2000 ». In : *Visions in Mathematics : GAFA 2000 Special volume, Part II* (2010), p. 481-559.
- [27] Thomas KRAJEWSKI. « Noncommutative Geometry and Fundamental Interactions ». In : *arXiv preprint math-ph/9903047* (1999).
- [28] Mohamed BEGUI. « Calcul des Éléments de Matrice Dipolaire dans une Géométrie Non Commutative ». Thèse de doct. Université Echahid Hamma Lakhder, El Oued, 2013.
- [29] Matthieu LEFRANÇOIS. « Théories des Champs Topologiques et Mécanique Quantique en Espace Non-Commutatif ». Thèse de doct. Université Claude Bernard-Lyon I, 2005.
- [30] Andrei MICU et Mohammad M. SHEIKH-JABBARI. « Noncommutative Φ^4 Theory at Two Loops ». In : *Journal of High Energy Physics* 2001.01 (2001), p. 025.
- [31] S. K. BOSE et N. GUPTA. « Exact Solution of Nonrelativistic Schrödinger Equation for Certain Central Physical Potential ». In : *Nuovo Cimento B* (1998).
- [32] L. BURAGOHAIN et Sas AHMED. « Exactly Solvable Quantum Mechanical Systems Generated from the Anharmonic Potentials ». In : *Latin-American Journal of Physics Education* 4.1 (2010), p. 14.

- [33] A. NIKNAM, A. A. RAJABI et M. SOLAIMANI. « Solutions of D-dimensional Schrödinger Equation for Woods-Saxon Potential with Spin-Orbit, Coulomb and Centrifugal Terms through a New Hybrid Numerical Fitting Nikiforov-Uvarov Method ». In : *Journal of Theoretical and Applied Physics* 10 (2016), p. 53-59.
- [34] Thomas L. CURTRIGHT et Cosmas K. ZACHOS. « Quantum Mechanics in Phase Space ». In : *Asia Pacific Physics Newsletter* 1.01 (2012), p. 37-46.
- [35] Edgard ELBAZ. *Quantum : The Quantum Theory of Particles, Fields and Cosmology*. Springer, 2012.
- [36] Abbas FARMANY et al. « Non-Commutative Geometry and Matrix Quantum Mechanics ». In : *Chaos, Solitons & Fractals* 42.1 (2009), p. 62-64.
- [37] Abdelmadjid MAIRECHE. « A New Nonrelativistic Atomic Energy Spectrum of Energy Dependent Potential for Heavy Quarkonium in Noncommutative Spaces and Phases Symmetries ». In : *Journal of Nano- and Electronic Physics* 8.2 (2016).
- [38] Joochan LEE. « Star Products and the Landau Problem ». In : *Journal of the Korean Physical Society* 47.4 (2005), p. 571.
- [39] Laure GOUBA. « A Comparative Review of Four Formulations of Noncommutative Quantum Mechanics ». In : *International Journal of Modern Physics A* 31.19 (2016), p. 1630025.
- [40] Luca MEZINCESCU. « Star Operation in Quantum Mechanics ». In : *arXiv preprint hep-th/0007046* (2000).
- [41] Shi-dong LIANG et Matthew J. LAKE. « An Introduction to Noncommutative Physics ». In : *Physics* 5.2 (2023), p. 436-460.
- [42] Masud CHAICHIAN, M. M. SHEIKH-JABBARI et A. TUREANU. « Comments on the Hydrogen Atom Spectrum in the Noncommutative Space ». In : *arXiv preprint hep-th/0212259* (2002).
- [43] Behrouz MIRZA, Rasoul NARIMANI et Somayeh ZARE. « Relativistic Oscillators in a Noncommutative Space and in a Magnetic Field ». In : *Communications in Theoretical Physics* 55.3 (2011), p. 405.
- [44] V. GALITSKI, B. KARNAKOV et V. KOGAN. *Problèmes de Mécanique Quantique*. Mir, 1985.
- [45] Adolf KRATZER. « Die Ultraroten Rotationsspektren der Halogenwasserstoffe ». In : *Zeitschrift für Physik* 3 (1920), p. 289-307.
- [46] Robert J. LEROY et Richard B. BERNSTEIN. « Dissociation Energy and Long-Range Potential of Diatomic Molecules from Vibrational Spacings of Higher Levels ». In : *The Journal of Chemical Physics* 52.8 (1970), p. 3869-3879.
- [47] M. MOUMNI, A. BENSLAMA et S. ZAIM. « Spectrum of Hydrogen Atom in Space-Time Noncommutativity ». In : *arXiv preprint arXiv :1003.5732* (2010).
- [48] Leonard I. SCHIFF. *Quantum Mechanics*. 3rd. McGraw-Hill, 1968.

-
- [49] Sameer IKHDAIR et Ramazan SEVER. « On Solutions of the Schrödinger Equation for Some Molecular Potentials : Wave Function Ansatz ». In : *Open Physics* 6.3 (2008), p. 697-703.
- [50] Sameer M. IKHDAIR et Ramazan SEVER. « A Perturbative Treatment for the Bound States of the Hellmann Potential ». In : *Journal of Molecular Structure : THEOCHEM* 809.1-3 (2007), p. 103-113.
- [51] Sameer M. IKHDAIR et Ramazan SEVER. « Polynomial Solutions of the Mie-Type Potential in the D-dimensional Schrödinger Equation ». In : *Journal of Molecular Structure : THEOCHEM* 855.1-3 (2008), p. 13-17.
- [52] Orhan BAYRAK, I. BOZTOSUN et Hakan CIFTCI. « Exact Analytical Solutions to the Kratzer Potential by the Asymptotic Iteration Method ». In : *International Journal of Quantum Chemistry* 107.3 (2007), p. 540-544.
- [53] M. DE OLIVEIRA. « Dirac–Kratzer Problem with Spin and Pseudo-Spin Symmetries in Curved Space–Time ». In : *International Journal of Modern Physics A* 36.29 (2021), p. 2150216.
- [54] Altuğ ARDA et Ramazan SEVER. « Bound-State Solutions of the Dirac Equation for the Kratzer Potential with Pseudoscalar-Coulomb Term ». In : *The European Physical Journal Plus* 134.1 (2019), p. 29.
- [55] Nasser SAAD, Richard HALL et Hakan CIFTCI. « The Klein-Gordon Equation with the Kratzer Potential in d Dimensions ». In : *Open Physics* 6.3 (2008), p. 717-729.
- [56] Abdelmadjid MAIRECHE. « Bound-State Solutions of Klein-Gordon and Schrödinger Equations for Arbitrary L-State with Linear Combination of Hulthen and Kratzer Potentials ». In : *The African Review of Physics* 15 (2020). ISSN : 1970-4097.
- [57] Abdelmadjid MAIRECHE. « A New Theoretical Study of the Deformed Unequal Scalar and Vector Hellmann Plus Modified Kratzer Potentials within the Deformed Klein-Gordon Equation in RNCQM Symmetries ». In : *Modern Physics Letters A* 36.33 (2021), p. 2150232.
- [58] Abdelmadjid MAIRECHE. « New Relativistic and Non-Relativistic Investigation of Deformed Klein-Gordon and Schrödinger Equations for New Improved Screened Kratzer Potential in the Framework of Non-Commutative Space ». In : *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics* 20.14 (2023).
- [59] Abdelmadjid MAIRECHE. « Improved Energy Spectra of the Deformed Klein-Gordon and Schrödinger Equations Under the Improved Varshni Plus Modified Kratzer Potential Model in the 3D-ERQM and 3D-ENRQM Symmetries ». In : *Indian Journal of Physics* 97.12 (2023), p. 3567-3579.
- [60] Abdelmadjid MAIRECHE. « New Eigensolution of the Klein-Gordon and Schrödinger Equations for Improved Modified Yukawa-Kratzer Potential and Its Applications Using Bopp’s Shift Method and Standard Perturbation Theory in the 3D-ERQM and 3D-ENRQM Symmetries ». In : *Revista Mexicana de Física* 69.6 (2023), p. 060802-1.

- [61] Abdelmadjid MAIRECHE. « New Non-Relativistic Bound States Solutions for Modified Kratzer Potential in One-Electron Atoms ». In : (2017).
- [62] Abdelmadjid MAIRECHE. « A Novel Exactly Theoretical Solvable of Bound States of the Dirac-Kratzer-Fues Problem with Spin and Pseudo-Spin Symmetry ». In : *International Frontier Science Letters* 10.8 (2016).
- [63] Abdelmadjid MAIRECHE. « Effects of Two-Dimensional Noncommutative Theories on Bound States Schrödinger Diatomic Molecules Under New Modified Kratzer-Type Interactions ». In : *International Letters of Chemistry, Physics and Astronomy* 76 (2017), p. 1-11.
- [64] Abdelmadjid MAIRECHE. « New Bound State Solutions of Diatomic Molecules and Mass Spectrum of Heavy Quarkonium with Improved Modified Kratzer Potential Plus Screened Coulomb Potential Model in the Framework of Three-Dimensional Nonrelativistic Noncommutative Phase-Space Symmetries ». In : *Molecular Physics* 121.13 (2023), e2205968.
- [65] Siegfried FLÜGGE. *Practical Quantum Mechanics*. Springer, 2012.
- [66] Mohammad R. SETARE et Ebrahim KARIMI. « Algebraic Approach to the Kratzer Potential ». In : *Physica Scripta* 75.1 (2006), p. 90.
- [67] Fateme HOSEINI, Jayanta K. SAHA et Hassan HASSANABADI. « Investigation of Fermions in Non-Commutative Space by Considering Kratzer Potential ». In : *Communications in Theoretical Physics* 65.6 (2016), p. 695.
- [68] Djamil BOUAZIZ. « Kratzer's Molecular Potential in Quantum Mechanics with a Generalized Uncertainty Principle ». In : *Annals of Physics* 355 (2015), p. 269-281.
- [69] Donald D. FITTS. *Principles of Quantum Mechanics : As Applied to Chemistry and Chemical Physics*. Cambridge University Press, 1999.
- [70] Hans A. BETHE et Edwin E. SALPETER. *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*. Springer, 2013.
- [71] Prafulla Kumar BEHERA et al., éd. *XXIII DAE High Energy Physics Symposium : Select Proceedings*. Springer, 2021.
- [72] Pulkit S. GHODERAO et P. RAMADEVI. « Are We Living in Non-Commutative Space? – Revisiting the Classic Hydrogen Atom System ». In : *arXiv preprint arXiv :1912.04846* (2019).
- [73] Ramamurti SHANKAR. *Principles of Quantum Mechanics*. Springer, 2012.
- [74] Richard ROBINETT. *Quantum Mechanics : Classical Results, Modern Systems, and Visualized Examples*. Oxford University Press, 2006.
- [75] Iraj R. AFNAN. *Quantum Mechanics with Applications*. Bentham Science Publishers, 2011.
- [76] G. ARULDHAS. *Quantum Mechanics : 500 Problems with Solutions*. PHI Learning, 2010.
- [77] Shabnam SIDDIQI. *Quantum Mechanics : A Simplified Approach*. CRC Press, 2018.

[78] Robert J. SCHERRER. *Quantum Mechanics : An Accessible Introduction*. World Scientific, 2024.

المخلص

في هذا العمل، وضحنا أهمية نموذج الهندسة غير تبديلية في النظرية الكمومية من خلال حل معادلة شرودينغر لأنواع مختلفة من الكمونات. باستخدام إزاحة بوب، اعتُبر العامل θ غير التبادلي اضطرابًا مستقلًا عن الزمن، وتطبيق هذا النهج على كمونات كراتزر والذرات الشبيهة بالهيدروجين الميونية منها وكذا الهيليوم، تُظهر الطرق التحليلية المستخدمة كيف أن الفضاء غير التبادلي يعطي حلولًا مختلفة عن حلول الفضاء التبادلي وكذلك يعدل مستويات الطاقة.

الكلمات المفتاحية: معادلة شرودينغر، ذرة الهيدروجين، الفضاء غير تبديلي، الكمون الكولومبي، كمون كراتزر، الذرات الشبيهة بالهيدروجين، الذرات الميونية، ذرة الهيليوم.

Abstract

In this thesis, we studied the effects of noncommutative geometry in quantum theory by solving the Schrödinger equation for different types of potentials. Using the Bopp shift displacement method, we treated the noncommutative parameter θ as a time-independent perturbation. Applying this approach to Kratzer potentials and hydrogen-like atoms, in particular muonic atoms and helium atoms, we have shown by analytical methods that non-commutative space leads to solutions that differ from those in commutative space, thereby changing the energy levels.

Keywords: Schrödinger's equation, Hydrogen atom, Noncommutative space, Coulomb potential, Kratzer potential, Hydrogen-like atoms, Muonic atoms , Helium atom.

Spectrum of the Kratzer-type molecule in non-commutative spaces

M Debabi*  and M Boussahel

Laboratory of Physics and Material Chemistry, Department of Physics, Faculty of Sciences, University of M'sila, University Pole, Road Bourdj Bou Arreiridj, 28000 M'sila, Algeria

Received: 08 March 2024 / Accepted: 13 September 2024

Abstract: An analytical formulation to determine the non-relativistic energy spectrum associated with the Kratzer potential has been exploited using the Bopp shift method within the framework of non-commutative geometry. A necessary analysis of the Kratzer potential is performed, identifying corrections to the second-order degenerate states, which are influenced by the non-commutative coefficient θ . To accomplish this ambitious task, we focused mainly on solving the Schrödinger equation with separated variables, always within the framework of non-commutative geometry.

Keywords: Non-commutative geometry space; The star-product; Bopp's shift method; Kratzer potential

1. Introduction

Over the past century, two revolutionary theories of physics have transformed our understanding of the universe: general relativity and quantum mechanics. General relativity, formulated by Albert Einstein in 1916, provides a comprehensive framework for understanding the behavior of objects on a cosmic scale. In contrast, quantum mechanics (QM), developed by pioneers such as Niels Bohr, Werner Heisenberg, Erwin Schrödinger, and Paul Dirac, addresses the phenomena occurring at the microscopic level.

Dirac's work in 1927 unified these two approaches into a single mathematical framework known as state vectors, which included the Heisenberg and Schrödinger formulations introduced successively in 1925 and 1926 [1].

In 1928, Dirac merged his state vector mechanics with special relativity, leading to the prediction of antimatter in 1930. Historically, the transition from non-relativistic to relativistic quantum mechanics involved the generalization of the Schrödinger equation where solving this equation is essential to study microscopic systems by determining over time the wave function and energy spectrum of possible states.

This work will explore the Schrödinger equation using the method of separation of variables, focusing on its application within non-commutative space. The

fundamental constant of quantum mechanics $\hbar = h/2\pi$ named in honor of Max Planck is the foundation of physical theory and is integral to the Heisenberg uncertainty principle expressed as $\Delta x \Delta p \simeq h/2$. This principle highlights the commutation relations of position and momentum operators within a Hilbert space:

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \quad (1)$$

Quantum mechanics in non-commutative space involves the examination of the Hamiltonian that depends on the position and momentum operators [2], which adhere to a noncanonical commutation algebra. The study of exactly solvable models in quantum mechanics can help us better understand some phenomena occurring in non-commutative quantum field theory.

Non-commutative geometry, which emerged in 1947 through the work of Snyder [3], introduces a novel perspective where the coordinates of spacetime do not follow traditional commutation rules. Unlike conventional geometry, which relies on commutative algebraic structures (where $ab = ba$). Non-commutative geometry [4–7] involves algebraic structures where $ab \neq ba$. This framework reshapes our understanding of spatial and temporal interactions, as reflected in the noncommuting behavior of position and momentum operators:

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] \neq 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] \neq 0. \quad (2)$$

Our aim in this work is to present a study of the energy corrections to the spectrum of a Kratzer-type molecule in a

*Corresponding author, E-mail: mourad.debabi@univ-msila.dz

non-commutative space, obtained by solving the Schrödinger equation with separated variables.

2. Non-commutative geometry

2.1. Non-commutative space time algebra

The three non-commutativity relations below can encapsulate the entirety of non-commutative algebra and its fundamental principles [8–10]:

$$\begin{cases} [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = i\theta_{ij} \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = i\sigma_{ij} \\ [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \end{cases} \quad (3)$$

The quantities θ_{ij} and σ_{ij} are real anti-symmetric parameters that may depend on the operators \hat{p} and \hat{x} , subject to the following conditions: $\theta_{ij} = \varepsilon_{ij}\theta$ and $\sigma_{ij} = \varepsilon_{ij}\sigma$ with $\varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji} = 1$. When we set $(\theta, \sigma) \rightarrow (0, 0)$, we obtain the relationships of ordinary quantum mechanics.

Non-commutativity is only achieved on positional operators by means of parameters (positional non-commutativity) [8]. Therefore, the algebra above is rewritten as:

$$\begin{cases} [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = i\theta_{ij} \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \\ [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \end{cases} \quad (4)$$

Where θ_{ij} is an anti-symmetric tensor with real elements:

$$\theta_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -\theta & 0 & 0 \\ \theta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

2.2. Weyl quantization

Weyl quantization is a technique used to describe quantum mechanics based on the phase space of classical mechanics. It enables the association of quantum operators with classical functions that depend on phase space variables, particularly canonical variables. This method offers a systematic approach to describe non-commutative spaces and to investigate field theories formulated within them.

2.2.1. The star-product

The star-product formalism, initially developed by Weyl and Wigner, provides a way to describe quantum mechanics using the phase space. Unlike the operator-based approach, it revolves around deforming the product

of phase space variables. This formalism can be applied effectively with the aid of the Fourier transform [10–14]:

$$\begin{aligned} f(x) &= (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{-ik_i x^i} \tilde{f}(k) \iff \tilde{f}(k) \\ &= (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{ik_i x^i} f(x). \end{aligned} \quad (6)$$

The Weyl symbol is defined as:

$$W(f) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{ik_i x^i} \tilde{f}(k). \quad (7)$$

If $f(x)$ are real functions, then the Weyl operator is Hermitian.

According to [8, 9, 15, 16], we can write the star-product of two functions at the first order of θ as follows:

$$\begin{aligned} f * g &= f(x) \exp\left(\frac{i}{2} \overleftarrow{\partial}_i \theta^{ij} \overrightarrow{\partial}_j\right) g(y) \Big|_{x=y} \\ &= f(x)g(x) + \frac{i}{2} \theta^{ij} \overleftarrow{\partial}_i f(x) \overrightarrow{\partial}_j g(x) + O(\theta^2) \Big|_{x=y}. \end{aligned} \quad (8)$$

If $\theta = 0$, the star-product of two functions is equal to the ordinary product of these functions, which corresponds to the commutative case.

$$f(x) * g(x) = f(x)g(x). \quad (9)$$

2.3. Schrödinger equation in non-commutative space

In D-dimensional non-commutative space-time, we replace wave function products with the star-product. The Schrödinger equation on non-commutative spacetime takes the following form [15, 17]:

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{x}) * \Psi(\vec{x}, t) = E\Psi(\vec{x}, t), \quad (10)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{x}, t) = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \right] * \Psi(\vec{x}, t). \quad (11)$$

The star-product between the potential operator and the wave function is defined as:

$$V(\vec{x}) * \Psi(\vec{x}, t) \rightarrow V(\vec{x}) * \Psi(\vec{x}, t). \quad (12)$$

In his research, Mezincescu [18] demonstrated that the following relationship holds true:

$$V(\vec{x}) * \Psi(\vec{x}) = V\left(\vec{x} - \frac{\vec{p}}{2}\right) \Psi(\vec{x}). \quad (13)$$

2.4. The ‘‘Bopp shift’’ formula

In the context of non-commutative spacetime, we can establish a relationship between the operators \hat{x}_i and \hat{p}_i , which represent position and momentum, and their conventional counterparts x_i and p_i [19] through the transformation [15, 18]:

$$\widehat{x}_i = x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_j, \quad (14)$$

$$\widehat{p}_j = p_j. \quad (15)$$

The last transformation is referred to as the ‘Bopp shift’.

3. Schrodinger equation with solutions for a Kratzer-type molecule

Generally, in QM the determination of exact analytical solutions to the Schrödinger equations is difficult and ongoing task, which is not always the case and the search for approximate solutions is necessary. In atomic and molecular physics, as well as in chemistry, the Kratzer potential [20, 21] is one of the most effective potential energy models used in quantum mechanics to describe molecular interactions, due to its central role in determining the energy of bound states.

The Kratzer potential [22], formed by combining the Coulomb potential with the inverse square potential, plays an important role in quantum chemistry, taking into account the influence of the nucleus (Coulomb term) and internal electrons (represented by an additional term) [23].

In quantum mechanics, where analytically solvable problems are limited [24], the Kratzer potential is one of the few for which an exact solution exists [25–28].

Bayrak [29] presented a comprehensive analytical demonstration, emphasizing the significance and practical value of obtaining the eigenvalues explicitly in theoretical chemistry problems.

On the other hand, we noticed in the literature that many researchers had addressed the study of this potential within the framework of relativistic and non-relativistic quantum mechanics [30–32] and non-commutative quantum mechanics [33–39]. Furthermore, an intriguing study on two-dimensional and three-dimensional space has been conducted [40, 41] within the non-commutative quantum mechanics framework.

These features have made it a subject of interest, and researchers have extensively examined Kratzer potential in Refs. [20, 22, 29, 42]:

$$V(r) = -2D\left(\frac{a}{r} - \frac{1}{2} \frac{a^2}{r^2}\right), \quad (16)$$

With a minimum of $V(r) = -D$ and D is the bond interaction dissociation energy between two atoms in the diatomic molecules separated by an equilibrium inter nuclear distance a Fig. 1. Where one of the two atoms can be much heavier than the other [22].

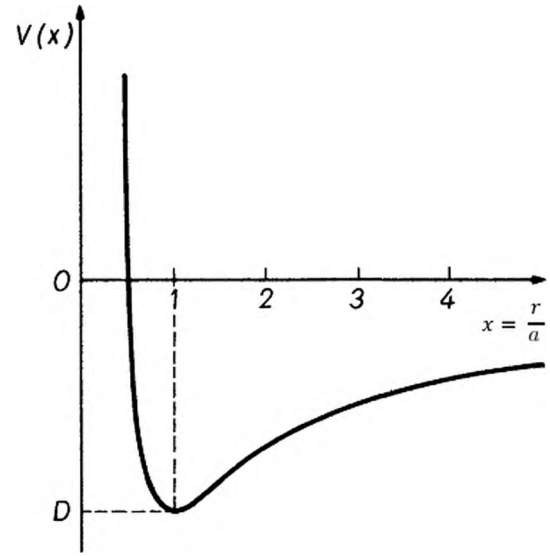


Fig. 1 Kratzer potential

3.1. Non-commutative case

Solving Schrödinger’s equation with the kratzer potential in non-commutative space first requires the introduction of the Bopp shift relation (14) into Eq. (16).

We have:

$$\widehat{x}_i = x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j, \quad (17)$$

where [43–46]:

$$r = \sqrt{\widehat{x}_i \widehat{x}_i}. \quad (18)$$

Now it is recommended that the relationship be maintained [47]:

$$\begin{aligned} V^{NC}(r) &= -2D_e \left(\frac{r_e}{\sqrt{\widehat{x}_i \widehat{x}_i}} - \frac{r_e^2}{2(\widehat{x}_i \widehat{x}_i)} \right) \quad (19) \\ &= -2D_e \left(\frac{r_e}{\sqrt{(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j)(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j)}} - \frac{r_e^2}{2(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j)(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j)} \right) \\ &= -2D_e \left(\frac{r_e}{(r^2 - \frac{\theta_{ij}}{\hbar} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2))^{\frac{1}{2}}} - \frac{r_e^2}{2(r^2 - \frac{\theta_{ij}}{\hbar} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2))} \right) \\ &= -2D_e \left(\frac{r_e}{(1 - \frac{\theta_{ij}}{\hbar r^2} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2))^{\frac{1}{2}}} - \frac{r_e^2}{2r^2(1 - \frac{\theta_{ij}}{\hbar r^2} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2))} \right) \\ &= \frac{-2D_e r_e}{r} \left(1 + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar r^2} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2) \right) + \frac{2D_e r_e^2}{2r^2} \left(1 + \frac{\theta_{ij}}{\hbar r^2} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2) \right) \\ &= \frac{-2D_e r_e}{r} + \frac{2D_e r_e^2}{2r^2} - 2D_e r_e \frac{\sum \varepsilon_{ijk} \theta_k \widehat{p}_j x_i}{4\hbar r^3} + 2D_e r_e^2 \frac{\sum \varepsilon_{ijk} \theta_k \widehat{p}_j x_i}{4\hbar r^4}, \quad (20) \end{aligned}$$

where $\vartheta(\theta^2)$ expresses the second-order term that will be neglected. Since:

$$\theta_{ij} = \frac{\varepsilon_{ijk}\theta_k}{2}. \quad (21)$$

We have:

$$\begin{aligned} \sum \varepsilon_{ijk} \theta_k \hat{p}_j x_i &= (x_2 p_3 - x_3 p_2)\theta_1 \\ &+ (x_3 p_1 - x_1 p_3)\theta_2 + (x_1 p_2 - x_2 p_1)\theta_3 \\ &= L_1\theta_1 + L_2\theta_2 + L_3\theta_3 \\ &= \vec{L} \cdot \vec{\theta}. \end{aligned} \quad (22)$$

Then:

$$V^{NC}(r) = -2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{D_e r_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right), \quad (23)$$

we find:

$$V^{NC}(r) = V^C(r) - \frac{D_e r_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right). \quad (24)$$

We can write the Hamiltonian operator in non-commutative space as follows:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V^{NC}(r). \quad (25)$$

The Schrödinger equation in non-commutative space:

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) = E\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi), \quad (26)$$

by substituting Eq. (23) into Eq. (26):

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) - 2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) \right. \\ &\left. - \frac{D_e r_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right] \Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) = E\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi), \end{aligned} \quad (27)$$

we have:

$$\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (28)$$

Right now, and by substituting (28) into (27):

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) - 2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) \right. \\ &\left. - \frac{D_e r_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right] R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) = ER_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (29)$$

where:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (30)$$

Finally, we have:

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) - 2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) \right. \\ &\left. - \frac{D_e r_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right] R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) = ER_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (31)$$

In this context, we can see that the angular part is the same as in the commutative case, where $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ represents:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{4\pi} \right)^3 \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} (-1)^m p_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (32)$$

On the other hand, the radial part is completely different from the commutative radial part. So:

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - 2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) \right. \\ &\left. - \frac{D_e r_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right] R_{nl}(r) = ER_{nl}(r), \end{aligned} \quad (33)$$

where n and l denote the radial and orbital angular momentum quantum numbers, r is the inter nuclear separation of the diatomic molecules.

Using the following change of variable:

$$R_{nl}(r) = \frac{U(r)}{r}, \quad (34)$$

we find:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2}{\partial r^2} U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \\ &\left(-2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{D_e r_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) - E \right) U(r) = 0. \end{aligned} \quad (35)$$

The Hamiltonian \hat{H}_θ becomes:

$$\hat{H}_\theta = \frac{\hat{p}^2}{2m} - 2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{D_e r_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right). \quad (36)$$

From the last relationship, we can observe that non-commutativity appears in the form of a perturbation.

$$\hat{W}_\theta = -\frac{D_e r_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right), \quad (37)$$

becomes

$$\widehat{W}_\theta = -\frac{D_e r_e L_z \theta}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right). \quad (38)$$

We observe that the expression above closely resembles that which describes spin-orbit coupling.

$$\widehat{W}_{s.o.} = -\frac{e^2}{2m^2 c^2} \left(\frac{\vec{L} \cdot \vec{S}}{r^3} \right). \quad (39)$$

By identifying the non-commutativity constant θ with the spin angular momentum S , it becomes evident that the non-commutativity constant assumes the role of spin. In simpler terms, one can state that spin derives from the non-commutativity of space.

In the following discussion, we will treat non-commutativity as a perturbation in order to identify and estimate the corrections to the energy levels of the Kratzer potential.

3.2. Energy corrections

Applying usual perturbation theory, the main corrections for energy levels resulting from non-commutativity, i.e. first order perturbation and the tree-level contributions in field theory, can be expressed as:

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle \psi_{n,l,m_l} | \widehat{W}_\theta | \psi_{n,l,m_l} \rangle, \quad (40)$$

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{D_e r_e \theta}{2\hbar} \int_0^\infty dr r^2 \int_0^{4\pi} \left[\langle \psi_{n,l,m_l}^+ | \frac{L_z}{r^3} | \psi_{n,l,m_l} \rangle - \langle \psi_{n,l,m_l}^+ | \frac{r_e L_z}{r^4} | \psi_{n,l,m_l} \rangle \right] d\Omega. \quad (41)$$

Let's use the following notation:

$$| \psi_{n,l,m_l} \rangle = | n, l, m_l \rangle, \quad (42)$$

Equation (40) becomes

$$\Delta E_n^{(1)} = \left\langle n, l, m_l \left| -\frac{D_e r_e L_z \theta}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right| n, l, m_l \right\rangle. \quad (43)$$

We find:

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{D_e r_e \theta m_l}{2} \left(\left\langle n, l, m_l \left| \frac{1}{r^3} \right| n, l, m_l \right\rangle - \left\langle n, l, m_l \left| \frac{r_e}{r^4} \right| n, l, m_l \right\rangle \right), \quad (44)$$

because:

$$\langle n, l, m_l | L_z | n, l, m_l \rangle = m_l \hbar. \quad (45)$$

It is observed that:

$$\left\langle n, l, m_l \left| \frac{1}{r^3} \right| n, l, m_l \right\rangle = \int_0^\infty dr r^2 R_{nl}^*(r) \frac{1}{r^3} R_{nl}(r) = \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle. \quad (46)$$

Since:

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{nl}^*(r) R_{nl}(r) = 1. \quad (47)$$

According to [48]

Concerning mean values $\langle r^k \rangle_{nl}$, distinctions among different radial eigenfunctions become particularly evident when we compute the mean value of r , the distance between the electron and the nucleus, raised to various powers. The mean value $\langle r^k \rangle_{nl}$ is defined as:

$$\begin{aligned} & \frac{k+1}{n^2} \langle r^k \rangle_{nl} - (2k+1) \frac{a_0}{z} \langle r^{k-1} \rangle_{nl} \\ & + k \left[l(l+1) + \frac{1-k^2}{4} \right] \langle r^{k-2} \rangle_{nl} = 0. \end{aligned} \quad (48)$$

Now, let's calculate the first energy correction $\Delta E_n^{(1)}$ by substituting Eqs. (100) and (101) into (44):

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(1)} &= -\frac{D_e r_e \theta m_l}{2} \left(\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle - \left\langle \frac{r_e}{r^4} \right\rangle \right) \\ &= -\frac{D_e r_e \theta m_l}{2} \left(\frac{Z^3}{a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l} - \frac{r_e Z^4 \frac{1}{2} [3n^2 - l(l+1)]}{a_0^4 n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} \right), \\ &= -\frac{D_e r_e \theta m_l}{2} \left(\frac{Z^3}{a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l} - \frac{r_e Z^4 \frac{1}{2} [3n^2 - l(l+1)]}{a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2})} \right) \\ &= -\frac{D_e r_e \theta m_l}{2} \left(\frac{Z^3 a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2})}{a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2})} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\frac{1}{2} r_e Z^4 [3n^2 - l(l+1)]}{a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2})} \right) \\ &= -\frac{D_e r_e \theta m_l}{2} \left(\frac{Z^3 a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2}) - r_e Z^4 \frac{1}{2} [3n^2 - l(l+1)]}{a_0^4 n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} \right). \end{aligned} \quad (51)$$

We put:

$$\begin{cases} g_1 = \frac{D_e Z^4 r_e^2}{a_0^4} \\ g_2 = \frac{2D_e Z^3 r_e}{a_0^3} \end{cases}, \quad (52)$$

therefore:

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(1)} &= -\frac{g_2 \theta m_l}{4n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})} \\ &+ \frac{g_1 \theta m_l [3n^2 - l(l+1)]}{4n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})(l-\frac{1}{2})}. \end{aligned} \quad (53)$$

When $g_1 = 0$, the Kratzer potential reduces to the Coulomb potential, and thus Eq. (53) becomes:

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{g_2 \theta m_l}{4n^3(l+1)(l+\frac{1}{2})l}, \quad (54)$$

this last equation yields the same result for the first-order energy spectrum of the hydrogen atom [43, 49, 50].

$$g_2 = 1$$

$$\Delta E_n^H = -\frac{\theta m_l}{4n^3 l(l+1)(l+\frac{1}{2})}. \quad (55)$$

According to perturbation theory. The Eq. (53) shows how non-commutativity affects energy levels of Kratzer-type molecules up to the first order. We denote the states of diatomic molecules through n , l , and m_l quantum numbers, this enables us to qualitatively evaluate the non-commutativity constant of space through by studying of its effects on energy levels in diatomic molecules as a whole.

For $n = 1$ the energy levels (53) are as follows when $l = 1 \rightarrow -l \leq m \leq l \rightarrow m = -1, 0, 1$, we examine three cases:

$$\cdot l = 1, m = -1$$

$$\Delta E_n^{(1)} = +\frac{g_2 \theta}{12} - \frac{g_1 \theta}{15}, \quad (56)$$

$$\cdot l = 1, m = 0$$

$$\Delta E_n^{(1)} = 0, \quad (57)$$

$$\cdot l = 1, m = +1$$

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{g_2 \theta}{12} + \frac{g_1 \theta}{15}. \quad (58)$$

Indeed [43, 44, 49, 50], it is crucial to recognize that the total angular momentum is conserved in such situations. Therefore, for a comprehensive treatment of this subject necessitates consideration of both orbital and spin quantum numbers, which can be achieved by replacing the states $|n, l, m_l\rangle$ with $|n, j, j_z\rangle$. It should be noted that $j = l + s$ represents the total angular momentum quantum number.

Now, we will amend the relationship (43) to align with the concept presented in the previous paragraph.

$$\Delta E_n^{(1)} = \left\langle n, j, j_z \left| -\frac{D_e r_e \theta_z \hat{L}_z}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right| n, j, j_z \right\rangle. \quad (59)$$

Taking into account the Clebsch-Gordan coefficients and Refs. [43, 49, 51] we have

$$\left\langle n, j, j_z \left| \hat{L}_z \right| n, j, j_z \right\rangle = \begin{cases} \left(1 - \frac{1}{2l+1}\right) j_z \hbar & \text{for } j = l + \frac{1}{2} \\ \left(1 + \frac{1}{2l+1}\right) j_z \hbar & \text{for } j = l - \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (60)$$

With this in mind, we can writing the first-order energy levels as follows:

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{D_e r_e \theta_z j_z}{2} \left(1 \mp \frac{1}{2l+1} \right) \left(\left\langle n, l', j, j'_z \left| \frac{1}{r^3} \right| n, l, j, j_z \right\rangle - \left\langle n, l', j, j'_z \left| \frac{r_e}{r^4} \right| n, l, j, j_z \right\rangle \right). \quad (61)$$

The energy shift level using relation (52), is given by

$$\Delta E_n^{(1)} = \frac{\theta_z j_z}{4} \left[\frac{g_1 [3n^2 - l(l+1)]}{n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} - \frac{g_2}{n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l} \right] \left(1 \mp \frac{1}{2l+1} \right), \quad (62)$$

for

$$j = l \pm \frac{1}{2}. \quad (63)$$

Despite the conservation of total angular momentum, our earlier approximation (20) was seemingly violated and this in order to achieve a satisfactory outcome, as evidenced by the analysis of Eq. (61).

4. Spin orbit coupling and fine structure

The total angular momentum of an atom is defined as the sum of its orbital and spin angular momenta:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (64)$$

which is a conserved quantity in a central field, in contrast to \mathbf{L} or \mathbf{S} separately. By squaring this sum to yield the following result:

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}. \quad (65)$$

\mathbf{L} and \mathbf{S} are commuting operators. Then

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2). \quad (66)$$

As the eigenvectors of the Hamilton operator are eigenvectors of all the three operators \mathbf{J}^2 , \mathbf{L}^2 and \mathbf{S}^2 with the respective eigenvalues $\hbar^2 j(j+1)$, $\hbar^2 l(l+1)$, $\hbar^2 s(s+1)$, where the j indicates coupled angular momentum and the energy is different for each j .

The fine structure is a relativistic correction to the kinetic energy. On the other hand the magnetic field interacts with the electron's internal magnetic moment, causing an additional energy shift $\Delta E = -\mathbf{m}\mathbf{B} = \frac{Ze_0^2}{2m_0c^2} \frac{\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}}{r^3}$. In contrast, in view of the aforementioned Eq. (38), we can express the energy correction due to the spin orbit interaction can be formulated as follows:

$$\Delta E = \frac{Dr_e L_z \theta}{2\hbar} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right). \quad (67)$$

4.1. The Lamb shift and noncommutative correction

According to relativistic quantum theory the actual energy levels of the $n = 2$; the $2S_{1/2}$ level should be exactly degenerate with $2P_{1/2}$, but in reality there is an energy interval between them, $E(2S_{1/2}) - E(2P_{1/2}) \simeq 1GH_z$. The shift of the $2S_{1/2}$ level to a higher energy than the E_{Dira} is about one tenth of the interval between the two fine-structure levels $E(2P_{3/2}) - E(2P_{1/2}) \simeq 11GH_z$. Although small, this discrepancy in hydrogen was of great historical importance in physics, As a result energies of $|n = 2, l = 1, s = 1/2\rangle$ which are split according to [50, 52]

$$j = \begin{cases} 3/2 & \rightarrow {}^2P_{3/2} \\ 1/2 & \rightarrow {}^2P_{1/2} \end{cases}, \quad (68)$$

and $|n = 2, l = 0, s = 1/2\rangle$ having,

$$j = 1/2 \quad \rightarrow \quad {}^2S_{1/2} \quad (69)$$

the explanation of this Lamb shift goes beyond relativistic quantum mechanics and requires quantum electrodynamics (QED).

Back to the Eq. (62) this last is in fact dependent on l , n and j_z where $j_z = -j, -j + 1, \dots, +j$. It is evident that the presence of j_z indicates that energy will be further divided according to its value, but it is not the same as the spectrum of a hydrogen atom [50].

This is due to the second term of Eq. (62) resulting from the Kratzer potential in non-commutative space. Notably, the first terms of Eq. (62) for ${}^2S_{1/2}$ and ${}^2P_{1/2}$ undergo a correction as follows:

$${}^2P_{1/2} = \begin{cases} {}^2P_{+1/2} \\ {}^2P_{-1/2} \end{cases}, \quad {}^2S_{1/2} = \begin{cases} {}^2S_{+1/2} \\ {}^2S_{-1/2} \end{cases}, \quad (70)$$

and the second term of Eq. (62), represented by the ${}^2P_{2/3}$ level where undergoes a correction as follows:

$${}^2P_{3/2} = \begin{cases} {}^2P_{+3/2} \\ {}^2P_{1/2} \\ {}^2P_{-1/2} \\ {}^2P_{-3/2} \end{cases}. \quad (71)$$

This last is a Spectrum of the Kratzer molecule in non-commutative spaces.

As a ‘‘toy’’ example, we can propose a spectral series to illustrate the effect of space non-commutativity in the case of the Kratzer molecule. In Fig. 2, since the limit approaches the hydrogen atom (see Eq. (55)), the ‘‘energy’’

levels correspond to those of the hydrogen atom, with the non-commutative effect becoming apparent only at the end. We also note that in Fig. 2, there is a great similarity with the Zeeman effect, Paschen effect, and other phenomena where interaction with a magnetic field and the atomic magnetic moment removes degeneracy and multiplies the initial atomic spectrum. Overall, we can predict a causal relationship between space non-commutativity and the degeneracy of atomic or molecular energy levels.

It is evident that the selection rules dictate that there are only transitions from ${}^2S_{1/2}$ to ${}^2P_{1/2}$ and from ${}^2P_{2/3}$ to ${}^2S_{1/2}$, respectively. Furthermore, we can see that this Spectrum corresponds to the hydrogen atom spectrum in non-commutative space when $g_1 = 0$ in the Eq. (62); where the upper part of the spectrum disappears. This confirms our findings in Eq. (55), this, in turn, corresponds to the [49, 50].

In the end, our efforts have culminated in the derivation of the energy spectrum for a diatomic molecule, characterized by Kratzer potential interaction in a non-commutative space, now taking into account the influence of spin to provide a more accurate result.

5. Conclusion

With this approach, our main objective was to solve the Schrödinger equation for the Kratzer potential within the limits of non-commutative space geometry. This non-commutativity was treated as a time-independent perturbation. It results in a simple shift of the position vector x_i to an equivalent vector \hat{x}_i defined by the relation $\hat{x}_i = x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_j$, which depends on the non-commutative parameter θ . Our study has revealed energy corrections up to the second order, directly contingent he depends the non-commutativity coefficient θ . Our results highlight the inherent complexity of understanding these corrections and thus underline the ongoing nature of research in this area.

Appendix 1

In this Appendix, we will calculate the commutators between the coordinates in phase and spatial space.

When dealing with a spatial dimension of $D = 2$, the aforementioned relationships can be represented as follows: ($\theta_{ij} = \varepsilon_{ij}\theta$ and $\varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji} = 1$)

$$\hat{x} = x - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_j = x - \frac{\theta}{2\hbar} p_y, \quad (72)$$

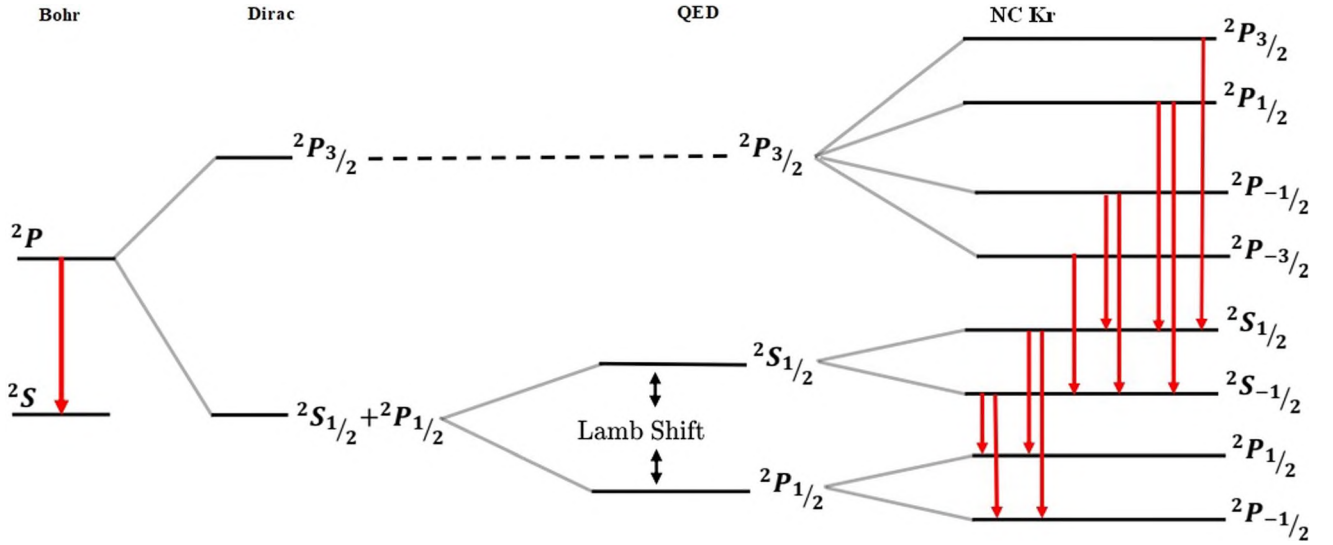


Fig. 2 Spectrum of the Kratzer molecule in non-commutative spaces

$$\hat{y} = y - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_x = y + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_x = y_t + \frac{\theta}{2\hbar} p_x, \quad (73)$$

$$\hat{p}_x = p_x, \quad (74)$$

$$\hat{p}_y = p_y. \quad (75)$$

Let's use Eqs. (14) and (15) to calculate the commutators:

$$[x_i, x_j], [x_i, p_j], [p_i, p_j]. \quad (76)$$

We find the commutation laws between coordinates in the classical case

$$\begin{aligned} [x_i, x_j] &= \left[\hat{x}_i + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_j, \hat{x}_j + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_i \right] \\ &= [\hat{x}_i, \hat{x}_j] + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} [\hat{x}_i, \hat{p}_i] + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} [\hat{p}_i, \hat{x}_i] + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \frac{\theta_{ji}}{2\hbar} [\hat{p}_j, \hat{p}_i] \\ &= i\theta_{ij} + \frac{\theta_{ji}}{2\hbar} (i) + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} (-i) + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \frac{\theta_{ji}}{2\hbar} (0) \\ &= i\theta_{ij} + \frac{-\theta_{ij}}{2\hbar} (i) + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} (-i) + 0 \\ &= 0, \end{aligned} \quad (77)$$

$$\implies [x_i, x_j] = 0. \quad (78)$$

$$\begin{aligned} [x_i, p_j] &= \left[\hat{x}_i + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_j, \hat{p}_j \right] \\ &= [\hat{x}_i, \hat{p}_j] + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} [\hat{p}_j, \hat{p}_j] \\ &= i\hbar\delta_{ij} + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} (0) \\ &= i\hbar\delta_{ij}, \end{aligned} \quad (79)$$

$$\implies [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}. \quad (80)$$

$$[p_i, p_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \quad (81)$$

Appendix 2

This part of the Appendix we will proof of the recurrence relation (48):

In the context of a hydrogen-like atom with quantum numbers n and l , the expectation values of $\langle r^k \rangle_{nl}$ for different powers of the radial variable r are calculated using Eq. (48).

$$\langle r^k \rangle_{nl} = \int_0^\infty r^k [R_{nl}(r)]^2 r^2 dr. \quad (82)$$

$R_{n,l}(r)$ represents the solutions to the radial differential equation $HR(r) = ER(r)$ we demonstrate that these values are linked by the recurrence relation (48). To simplify the concept, let's define the real function $u(r)$ us $u = rR_{n,l}$ and denote its first and second derivatives as u' and u'' .

The Eq. (82) then takes the form:

$$\langle r^k \rangle_{nl} = \int_0^\infty r^k u^2 dr. \quad (83)$$

Since we have:

$$\frac{\partial R_{nl}(r)}{\partial r} = \frac{u'}{r} - \frac{u}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R_{nl}(r)}{\partial r} \right) = ru''. \quad (84)$$

Starting from the relationship:

$$HR(r) = ER(r), \quad (85)$$

it becomes:

$$u'' = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2z}{a_0 r} + \frac{z^2}{n^2 a_0^2} \right] u. \quad (86)$$

With the introduction of the energy equation $E_n = -\frac{ze^2}{2a_0 n^2}$, we begin by first deriving the useful relationship before directly deriving Eq. (48). Let's consider the integral:

$$\int_0^\infty r^v u u' dr. \quad (87)$$

We perform integration by parts:

$$\int_0^\infty r^v u u' dr = r^v u^2 \Big|_0^\infty - \int_0^\infty u \frac{\partial}{\partial r} (r^v u) dr. \quad (88)$$

The first part of the integral disappears because when $R(r) \rightarrow 0$ exponentially as $r \rightarrow \infty$, and $u(r) \rightarrow 0$ as $r \rightarrow 0$.

Expanding the derivative in the integral on the right-hand side, we get

$$\int_0^\infty r^v u u' dr = -v \int_0^\infty r^{v-1} u^2 dr - \int_0^\infty r^v u u' dr. \quad (89)$$

By combining the integral on the left-hand side with the last one on the right-hand side, we get the result

$$\int_0^\infty r^v u u' dr = -\frac{v}{2} \langle r^{v-1} \rangle_{nl}. \quad (90)$$

To obtain the recurrence relation (48), we multiply the Eq. (86) by $r^{k+1} u'$ and integral over r .

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^{k+1} u' u'' dr &= l(l+1) \int_0^\infty r^{k-1} u u' dr \\ &\quad - \frac{2z}{a_0} \int_0^\infty r^k u u' dr + \frac{z^2}{n^2 a_0^2} \int_0^\infty r^{k+1} u u' dr \\ &= \frac{l(l+1)(k-1)}{2} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} \\ &\quad + \frac{kz}{a_0} \langle r^{k-1} \rangle_{nl} - \frac{(k+1)z^2}{2n^2 a_0^2} \langle r^k \rangle_{nl}. \end{aligned} \quad (91)$$

The left-hand integral of Eq. (91) can be integrated as:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^{k+1} u' u'' dr &= - \int_0^\infty u' \frac{\partial}{\partial r} (r^{k+1} u') dr \\ &= - (k+1) \int_0^\infty r^k u' u' dr - \int_0^\infty r^{k+1} u' u'' dr \\ &= (k+1) \int_0^\infty u \frac{\partial}{\partial r} (r^k u') dr - \int_0^\infty r^{k+1} u' u'' dr \\ &= k(k+1) \int_0^\infty r^{k-1} u u' dr + (k+1) \int_0^\infty r^k u u' dr \\ &\quad - \int_0^\infty r^{k+1} u' u'' dr. \end{aligned} \quad (92)$$

The integral on the left-hand side and the last integral on the right-hand side can be combined to yield:

$$\int_0^\infty r^{k+1} u' u'' dr = -\frac{k(k-1)(k+1)}{4} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} + \frac{(k+1)}{2} \int_0^\infty r^k u u' dr. \quad (93)$$

Here we use the Eq. (90) in the first integral on the right-hand side.

Let's Substitution of Eq. (86) for u'' in the last integral on the right-hand side of (93):

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^{k+1} u' u'' dr &= -\frac{(k-1)k(k+1)}{4} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} \\ &\quad + \frac{(k+1)l(l+1)}{2} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} \\ &\quad - \frac{(k+1)Z}{a_0} \langle r^{k-1} \rangle_{nl} + \frac{(k+1)Z^2}{2n^2 a_0^2} \langle r^k \rangle_{nl}. \end{aligned} \quad (94)$$

Finally, by combining Eqs. (91) and (94), we arrive at the recurrence relation (48).

Now, by using the relation (48) for $k = (0, 1, -1)$, we obtain [48] For $k = 0$

$$\langle r^{-1} \rangle = \frac{Z}{a_0 n^2}. \quad (95)$$

For $k = 1$

$$\frac{2}{n^2} \langle r \rangle - \frac{3a_0}{Z} + l(l+1) \frac{a_0^2}{Z^2} \langle r^{-1} \rangle = 0, \quad (96)$$

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2Z} [3n^2 - l(l+1)]. \quad (97)$$

For $k = -1$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z}{l(l+1)a_0} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle. \quad (98)$$

and from [48, 53] we have

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l + \frac{1}{2})}. \quad (99)$$

We replace (99) in (98):

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l}. \quad (100)$$

Finally [54]:

$$\left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle = \frac{Z^4 [3n^2 - l(l+1)]}{2a_0^4 n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})}. \quad (101)$$

where $a_0 = \frac{\hbar^2}{2me^2}$ is the 1st Bohr radius.

References

- [1] W Heisenberg *Letter to R. Peierls (1930)*, in *Wolfgang Pauli, Scientific Correspondence*, (eds.) K von Meyenn (Springer Verlag) vol. **III**, p. 15 (1985)
- [2] C Zachos, D Fairlie and T Curtright *Quantum Mechanics in Phase Space: An Overview with Selected Papers. World Scientific Series in 20th Century Physics*, **34** (2005)
- [3] H S Snyder *Phys. Rev.* **71** 38 (1947)
- [4] A Connes *Inst. hautes etudes sci. Publ. Math* **62** 257 (1985)
- [5] M Dubois-Violette, R Kerner and J Madore *J. Math. Phys.* **31** 316 (1990)
- [6] A Connes *Noncommutative Geometry: Year 2000*, e-Print: [math/0011193]
- [7] R J Szabo *Phys. Rep.* **378** 207 (2003)
- [8] A Farmany, R Lotfekar, S Abbasi, A Naghipour and A Farmany *Chaos, Solitons Fractals* **42** 62 (2009)
- [9] A Micu and M M Sheikh-Jabbari *J. High Energy Phys.* **0101** 025 (2001)
- [10] J C Varilly *Eur. Math. Soc.* (2006)
- [11] L Castellani *Class. Quantum Gravity*, **17** 3377 (2000)
- [12] C Alain and M Marcolli *Am. Math. Soc.* **55** (2019)
- [13] Z Alessandro *Applications of the Weyl-Wigner Formalism to Noncommutative Geometry*, e-Print: hep-th/0505271 (2005)
- [14] C Bastos, O Bertolami, N C Dias, J N Prata *J. Math. Phys.* **49** (2008)
- [15] L Gouba *Int. J. Modern Phys. A* **31** 1630025 (2016)
- [16] A Maireche *J. Nano-Electron. Phys.* **8** 02046 (2016)
- [17] J Lee *J. Korean Phys. Soc.* **47** 571 (2005)
- [18] L Mezincescu, hep-th/0007046 (2000)
- [19] S D Liang and M J Lake *Physics* **5** 436 (2023)
- [20] A Kratzer *Z. Phys.* **3** 289 (1920)
- [21] R J Le Roy and R B Bernstein *J. Chem. Phys.* **52** 3869 (1970)
- [22] S Flüge *Practical Quantum Mechanics* (Berlin: Springer-Verlag) (1994)
- [23] M Moumni, A BenSlama and S Zaim *Afr. Rev. Phys.* **7** 0010 (2012)
- [24] L I Schiff *Quantum Mechanics*, 3rd edn. (New York: McGraw-Hill) (1968)
- [25] S Ikhdair and R Sever *Open Phys.* **6** 697 (2008)
- [26] S M Ikhdair and R Sever *J. Math. Chem.* **45** 1137 (2009)
- [27] S M Ikhdair and R Sever *J. Mol. Struct. Theochem.* **809** 103 (2007)
- [28] S M Ikhdair and R Sever *J. Mol. Struct. Theochem.* **855** 13 (2008)
- [29] O Bayrak, I Boztosun and H Cifti *Int. J. Quant. Chem.* **107** 540 (2007)
- [30] M D De Oliveira *Int. J. Modern Phys. A* **36** 2150216 (2021)
- [31] A Arda, R Sever *Eur. Phys. J. Plus* **134** 29 (2019)
- [32] N Saad, R J Hall and H Cifti *Central Eur. J. Phys.* **6** 717 (2008)
- [33] A Maireche *Modern Phys. Lett. A* **36** 2150232 (2021)
- [34] A Maireche *Int. J. Geom. Methods Modern Phys.* **20** 2450016 (2023)
- [35] A Maireche *Afr. Rev. Phys.* **15** 19 (2020)
- [36] A Maireche *Indian J. Phys.* **97** 3567 (2023)
- [37] A Maireche *Revista Mexicana De Física* **69** 060802 (2023)
- [38] A Maireche *J. Nano- Electron. Phys.* **9** 03031 (2017)
- [39] A Maireche *Int. Front. Sci. Lett.* **10** 8 (2016)
- [40] A Maireche *Int. Lett. Chem. Phys. Astron.* **76** 1 (2017)
- [41] A Maireche *Mol. Phys.* **121** e2205968 (2023)
- [42] M R Setare and E Karimi *Physica Scripta* **75** 90 (2006)
- [43] M Chaichian, M M Sheikh-Jabbari and A Tureanu *Phys. Rev. Lett.* **86** 2716 (2001)
- [44] M Chaichian, M M Sheikh-Jabbari and A Tureanu *Eur. Phys. J. C* **36** 251 (2004)
- [45] B Mirza, R Narimani and S Zare *Commun. Theor. Phys.* **55** 405 (2011)
- [46] F Hoseini, J K Saha and H Hassanabadi *Commun. Theor. Phys.* **65** 695 (2016)
- [47] D Bouaziz *Ann. Phys.* **355** 269 (2015)
- [48] D Donald Fitts *Principles of Quantum Mechanics*, 2nd edn. (Cambridge: Cambridge University Press) (2002)
- [49] S Pulkit, G V Gavai and P Ramadevi *XXIII DAE High Energy Physics Symposium: Select Proceedings*, (Berlin: Springer) p 429 (2021)
- [50] P S Ghoderao and P Ramadevi, e-Print: [quant-ph/1912.04846] (2019)
- [51] R Shankar *Principles of Quantum Mechanics* (New York: Springer) (1994)
- [52] M Mustafa, A BenSlama and S Zaim AIP Conference Proceedings 8, vol. **1444**, p 53, *American Institute of Physics* (2012)
- [53] R Robinett *Quantum Mechanics: Classical Results, Modern Systems, and Visualized Examples* (Oxford: Oxford University Press) (2006)
- [54] H A Bethe and E E Salpeter *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* (Berlin, New York: Springer-Verlag, Academic Press) (1958)

Publisher's Note Springer Nature remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.

Springer Nature or its licensor (e.g. a society or other partner) holds exclusive rights to this article under a publishing agreement with the author(s) or other rightsholder(s); author self-archiving of the accepted manuscript version of this article is solely governed by the terms of such publishing agreement and applicable law.

المخلص

في هذا العمل، وضحنا أهمية نموذج الهندسة غير تبديلية في النظرية الكمومية من خلال حل معادلة شرودينغر لأنواع مختلفة من الكمونات. باستخدام إزاحة بوب، اعتُبر العامل θ غير التبادلي اضطرابًا مستقلًا عن الزمن، وتطبيق هذا النهج على كمونات كراتزر والذرات الشبيهة بالهيدروجين الميونية منها وكذا الهيليوم، تُظهر الطرق التحليلية المستخدمة كيف أن الفضاء غير التبادلي يعطي حلولاً مختلفة عن حلول الفضاء التبادلي وكذلك يعدل مستويات الطاقة.

الكلمات المفتاحية: معادلة شرودينغر، ذرة الهيدروجين، الفضاء غير تبديلي، الكمون الكولومبي، كمون كراتزر، الذرات الشبيهة بالهيدروجين، الذرات الميونية، ذرة الهيليوم.

Abstract

In this thesis, we studied the effects of noncommutative geometry in quantum theory by solving the Schrödinger equation for different types of potentials. Using the Bopp shift displacement method, we treated the noncommutative parameter θ as a time-independent perturbation. Applying this approach to Kratzer potentials and hydrogen-like atoms, in particular muonic atoms and helium atoms, we have shown by analytical methods that non-commutative space leads to solutions that differ from those in commutative space, thereby changing the energy levels.

Keywords: Schrödinger's equation, Hydrogen atom, Noncommutative space, Coulomb potential, Kratzer potential, Hydrogen-like atoms, Muonic atoms , Helium atom.