

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT : DE PHYSIQUE
N° :



DOMAINE : SCIENCES DE LA
MATIÈRE
FILIERE : PHYSIQUE
OPTION : PHYSIQUE THEORIQUE

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par : SERAICHE Fatiha

Intitulé

**La solution exacte de l'équation de Schrödinger
stationnaire et non stationnaire pour le potentiel
hyperbolique**

Soutenu le 27 /06 /2018 devant le jury composé de :

Abd Almadjid .Maireche	Université M'sila	Président
Salim .MEDJBER	Université M'sila	Rapporteur
Salim .Menouar	Université Sétif	Examineur1
Saliha .Beskri	Université M'sila	Examineur2

Année universitaire : 2017/2018

REMERCIEMENTS

Je remercie Dieu tout puissant qui m'a aidé de terminer ce travail.

Je tiens, avant tout, à exprimer ma profonde gratitude à monsieur Medjber_sasim, qui a assumé la direction de ce travail. Qu'il veuille bien trouver ici l'expression de ma reconnaissance pour son dévouement, sa patience, sa disponibilité, ses conseils et son aide constante qu'il m'a apporté tout au long de ce travail.

Je remercie les membres de jury qui ont accepté de juger ce travail et d'y apporter leur caution.

DEDICACES

*Je remercie le Dieu pour m'avoir donné la force
d'accomplir ce travail pour aller plus loin In Chaa
Allah.*

*Je dédie ce travail à mes parents, ma mère pour ses
encouragements et ses prières tout au long de mes
études, mon père pour tout ce qu'il a fait pour que
je puisse avoir ce résultat.*

Je le dédie à mes frères et sœurs.

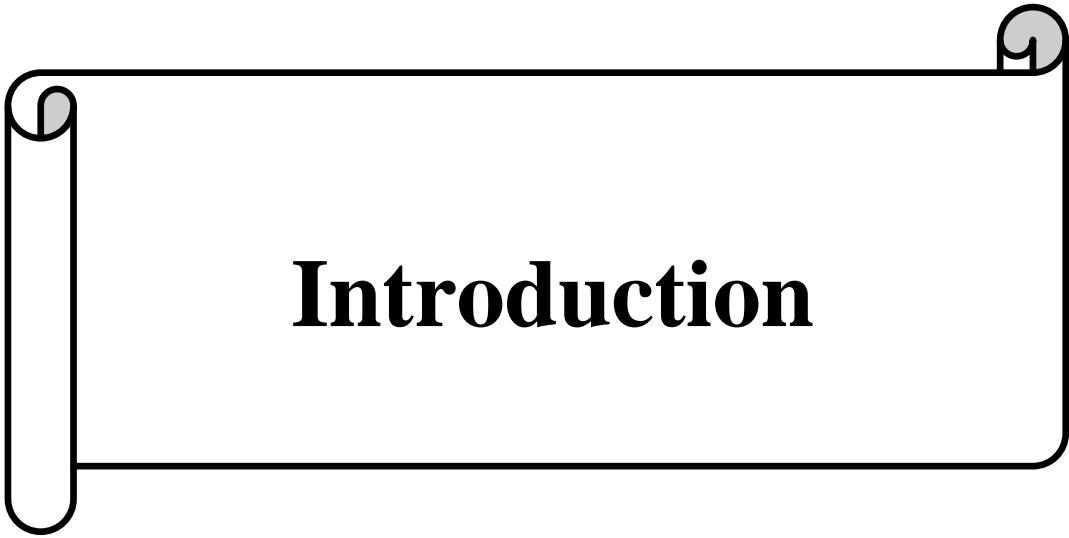
A tous mes amis sans citer les noms.

Table des matières

Introduction	04
<u>Chapitre I : L'équation de Schrödinger indépendant du temps</u>	
1-Introduction.....	07
2-Construction de l'équation de Schrödinger.....	07
3-Solution de l'équation de Schrödinger.....	09
3.1-Introduction	09
3.2-La fonction d'onde	10
3.3-L'équation de Schrödinger stationnaire.....	10
3.3.1-L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension.....	11
3.3.2-L'équation de Schrödinger stationnaire à trois dimensions	12
a- La séparation des variables	13
4-Les méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire	14
4.1-Méthodes numériques	14
4.2-Méthodes analytiques	14
4.2.1- la méthode de perturbation	14
a -Principe de la méthode	14
a.1-Valeurs propres de $H(\lambda)$	15
b-La correction d'énergie	16
b.1-La correction au vecteur propre	16
4.2.2- la méthode variationnelle	17
a. principe de la méthode	17
<u>Chapitre II : L'équation de Schrödinger dépendant du temps</u>	
1-Introduction.....	20
2-Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps	20
2.1. Méthodes approximatives	20
2.1.1. La théorie de perturbation	20
2.1.2- Méthode variationnelle	21

2.1.3- L'approximation soudaine.....	21
2.1.4-L'approximation adiabatique	21
2.2 -Méthodes exactes	22
2.2.1-Transformations unitaires.....	22
2.2.2- L'opérateur d'évolution.....	23
2.2.3-Changement de représentation.....	24
2.2.4- La théorie des invariants	25
1-Introduction.....	25
2- Les invariants	25
2-1- Propriétés de l'invariant	26
a- Valeurs propres de l'invariant I	26
b- Les vecteurs propres de I.....	28
c-Solution générale	30
<u>Chapitre III : la Solution de l'équation de Schrödinger indépendant et dépendant du temps</u>	
1-Introduction	32
2-l'équation de Schrödinger.....	32
2-1-La solution de l'équation de Schrödinger stationnaire.....	32
2-1-1- La Méthode (N-U)	33
a- Le spectre d'énergie	38
b- La fonction d'onde	38
2-2- L'équation de Schrödinger non stationnaire	39
a- Le spectre d'énergie	41
b-La fonction d'onde	41

Conclusion



Introduction

Introduction

En mécanique quantique, les systèmes non stationnaires sont représentés par un hamiltonien dépendant explicitement du temps. Ces systèmes sont difficiles à résoudre exactement, particulièrement la solution analytique de l'équation de Schrödinger.

L'équation de Schrödinger joue un rôle fondamental en mécanique quantique par analogie à celle de Newton en mécanique classique, car elle régit l'évolution spatiale et temporelle du système physique.

Depuis la publication du travail de Schrödinger [1], les physiciens théoriciens se sont penchés à trouver des solutions à l'équation de Schrödinger pour différents systèmes physiques à partir de plusieurs méthodes, soit analytique ou numérique ; à partir de cette solution, on obtient une fonction d'onde permettant d'identifier le système quantique étudié.

Pour les systèmes indépendants du temps (stationnaires), on sépare les variables (temps, espace), et on obtient ainsi l'équation de Schrödinger stationnaire, qui a été résolue seulement pour quelques systèmes simples comme l'oscillateur harmonique, particule libre, atome d'hydrogène [2]... , alors que la plupart des autres cas sont restés sans solutions, ils n'ont pas pu être résolus que par des méthodes approximatives ou numériques. Cependant pour les systèmes non stationnaires où l'Hamiltonien dépend du temps, on utilise les méthodes approximatives pour la solution de l'équation de Schrödinger, telles que la méthode de perturbation [3], l'approximation adiabatique [4], et l'approximation soudaine [4], et dont l'application était très limitée, ce qui a poussé les physiciens à proposer plusieurs méthodes et techniques différentes pour étudier les systèmes physiques dont l'Hamiltonien dépend des paramètres variant en fonction du temps, on peut citer la méthode de transformation unitaire [4], l'opérateur d'évolution [4], le changement de représentation [4] et la méthode d'invariant [5]. Le choix d'une meilleure méthode est selon la forme de l'Hamiltonien du système et la fonction d'onde qu'on peut trouver.

Dans ce mémoire, on va résoudre l'équation de Schrödinger unidimensionnelle pour le potentiel hyperbolique stationnaire et non stationnaire. Le potentiel hyperbolique décrit la vibration moléculaire diatomique [6]. Pour le potentiel hyperbolique stationnaire, on applique la méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U) [7] pour réduire l'équation différentielle du deuxième degré à une équation différentielle de type hypergéométrique. Enfin, on obtiendra la forme finale des fonctions d'onde en termes de polynôme de Jacobi. Alors que pour le potentiel

hyperbolique dépendant du temps qui n'est pas étudié dans la littérature, on utilise la méthode de séparation des variables et la méthode (N-U), on obtiendra les fonctions d'onde correspondantes aussi en termes du polynôme de Jacobi.

Notre mémoire est subdivisé en trois chapitres :

Le premier chapitre est consacré à l'équation de Schrödinger stationnaire (indépendante du temps) avec ses méthodes de solution, dans le deuxième chapitre on présente l'équation de Schrödinger non stationnaire (dépendante du temps) avec leurs méthodes de solution.

Au dernier chapitre, on détaille les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire et non stationnaire pour le potentiel hyperbolique.



Chapitre I

L'équation de Schrödinger indépendante du temps

1. Introduction

L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la mécanique quantique non relativiste. Elle joue en mécanique quantique le même rôle fondateur que l'équation de Newton en mécanique classique ou les équations de Maxwell en électromagnétisme. Elle décrit l'évolution temporelle et spatiale de l'état d'un objet quantique représenté par une fonction d'onde.

2. Construction de l'équation de Schrödinger

Le physicien autrichien Erwin Schrödinger [1] utilisa les résultats de De Broglie pour établir une équation régissant l'évolution spatiale et temporelle de la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ d'un système physique.

Pour obtenir l'équation de Schrödinger, en prenant la formule de l'onde plane de Broglie :

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

Dans la suite, il sera plus intéressant de considérer la pulsation ω et le nombre d'onde K , qui d'après les postulats de la mécanique quantique sont liés à la particule classique par :

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

$$P = \hbar k \quad (\text{I} - 3)$$

alors ;

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{P}\vec{r}-Et)} \quad (\text{I} - 4)$$

On remarque alors qu'en dérivant l'onde par rapport au temps, il vient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} E A e^{i(\vec{P}\vec{r}-Et)} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I} - 5)$$

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

alors :

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (\text{I} - 7)$$

\hat{E} : l'opérateur d'énergie.

De même le gradient de cette fonction d'onde donne :

$$\vec{\nabla}\Psi(\vec{r}, t) = \frac{i}{\hbar}\vec{P}\psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I} - 8)$$

d'où

$$\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \quad (\text{I} - 9)$$

\hat{p} : l'opérateur d'impulsion.

avec :

$$\vec{\nabla} = \vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z} \quad (\text{I} - 10)$$

Pour une particule libre, d'après la mécanique classique, l'énergie mécanique est donné par :

$$E = E_c = T = \frac{p^2}{2m} \quad (\text{I} - 11)$$

Cette quantité apparaît dans la formulation hamiltonienne pour une particule libre $U(r) = 0$ de la mécanique classique.

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

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

pour l'impulsion : $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, on a :

$$\frac{p^2}{2m}\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla})^2\Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I} - 13)$$

Donc l'équation de Schrödinger devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I} - 14)$$

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

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad (\text{I} - 15)$$

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

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I} - 16)$$

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

$$E = T + U(r) = \frac{p^2}{2m} + U(r) \quad (\text{I} - 17)$$

avec cette nouvelle valeur d'énergie et à partir de l'énergie (I-7) et l'opérateur d'impulsion \hat{p} , l'équation de Schrödinger devient :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I} - 18)$$

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \quad (\text{I} - 19)$$

en utilisant cet opérateur, on peut simplifier l'équation de Schrödinger :

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I} - 20)$$

3-Solution de l'équation de Schrödinger

3.1-Introduction

Depuis la publication du travail de Schrödinger, les physiciens théoriciens se sont penchés à trouver des solutions à partir des plusieurs méthodes mathématiques pour résoudre l'équation de Schrödinger, soit analytique ou numérique, à partir de cette solution, on obtient une fonction d'onde qui nous permet d'identifier le système quantique étudié [8].

En mécanique classique, l'état d'un système est donné par la résolution des équations du mouvement du système, par contre, en mécanique quantique, l'état du système est déterminé par la résolution de l'équation de Schrödinger.

3.2-La fonction d'onde

Les solutions de l'équation de Schrödinger d'un système quantique sont appelées les fonctions d'onde, elles peuvent être considérées comme un postulat quantique qui décrit l'état quantique d'une particule et contient toutes les informations qu'on veut connaître du système. La fonction d'onde $\psi(x, t)$ doit satisfaire les conditions suivantes :

- Elle doit être continue pour x .

-La dérivée $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ doit être continue, ces contraintes sont appliquées sous condition de la limite sur les solutions.

-Elle doit être normalisée. Cela implique que la fonction d'onde en approche à zéro comme x approche à l'infini c'est-à-dire :

$$\int \psi^* \psi d^3r = \int |\psi|^2 d^3r = 1 \quad (I - 21)$$

avec $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ est la densité de probabilité.

Comme on a vu que l'équation de Schrödinger est une équation aux dérivées partielles du premier ordre par rapport au temps et de deuxième ordre par rapport aux coordonnées spatiales .C'est une équation difficile à résoudre pour la plupart de systèmes quantiques.

Il existe deux types d'équations de Schrödinger : l'équation de Schrödinger indépendante du temps (stationnaire) et l'équation de Schrödinger dépendante du temps (non stationnaire).

3.3-L'équation de Schrödinger stationnaire

L'équation de Schrödinger est une équation aux dérivées partielles, du premier ordre par rapport au temps et du second ordre par rapport aux coordonnées de l'espace ordinaire. Si l'hamiltonien du système physique ne dépend pas explicitement du temps, l'équation de Schrödinger est dite stationnaire, dans ce cas l'énergie totale E est conservée, donc l'équation de Schrödinger admet des solutions particulières sous forme :

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \varphi(\vec{r}) \quad (I - 22)$$

où E : l'énergie, et $\varphi(\vec{r})$ satisfait l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \quad (\text{I} - 23)$$

3.3.1-L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension

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

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right] \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (\text{I} - 24)$$

en général si le potentiel V est une fonction de x uniquement, dans ce cas l'hamiltonien de système ne dépend pas du temps, on peut résoudre l'équation de Schrödinger par la méthode de séparation des variables :

$$\psi(x, t) = \varphi(x)\chi(t) \quad (\text{I} - 25)$$

en substituant dans l'équation de Schrödinger, on obtient :

$$\left(i\hbar \frac{d\chi}{dt} \right) \varphi(x) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) \right\} \chi(t) \quad (\text{I} - 26)$$

par conséquence :

$$\frac{i\hbar d\chi}{\chi dt} = \frac{\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + V(\vec{x}) \varphi(\vec{x}) \right\}}{\varphi} \quad (\text{I} - 27)$$

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

alors :

$$\frac{i\hbar d\chi}{\chi dt} = E \quad (\text{I} - 28)$$

et par conséquent :

$$\chi(t) = Ae^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (\text{I} - 29)$$

tandis que :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + v(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (\text{I} - 30)$$

qu'on appelle « l'équation de Schrödinger stationnaire (indépendante du temps) » .donc :

$$\psi(x, t) = A e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \varphi(x) \quad (\text{I} - 31)$$

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

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - v(x))\varphi(x) = 0 \quad (\text{I} - 32)$$

3.3.2-L'équation de Schrödinger stationnaire à trois dimensions :

On considère une particule de masse m et de vecteur position \vec{r} se trouve dans un potentiel central $V(r)$, en mécanique quantique, il s'agit de résoudre l'équation aux valeurs propres de l' Hamiltonien H associé à l'énergie E de la particule :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \quad (\text{I} - 33)$$

Comme le potentiel est central, les coordonnées sphériques sont mieux adaptées à laplacien Δ qui s'écrit :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \quad (\text{I} - 34)$$

avec :

$$L^2 = \hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (\text{I} - 35)$$

où L : est l'opérateur du moment cinétique.

et $0 < r < +\infty$, et θ, φ les angles polaires : $0 \leq \theta \leq \pi$ et $0 \leq \varphi \leq 2\pi$

l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad (\text{I} - 36)$$

Ce qui permet d'écrire l'équation aux valeurs propres sous la forme :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (\text{I} - 37)$$

où $\psi(r, \theta, \varphi)$ est la fonction propre de l'Hamiltonien, et E son énergie propre .

a- La séparation des variables

L'expression (1-35) montre que toute la dépendance en θ, φ est contenue dans l'opérateur L^2 et on a $[H, L^2] = 0$ et $[H, L_z] = 0$, les trois observables H, L^2, L_z admettent un système complet de fonctions propre [9] ; de sorte que l'on a :

$$H\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (I - 38)$$

$$L^2\psi(r, \theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2\psi(r, \theta, \varphi) \quad (I - 39)$$

$$L_z\psi(r, \theta, \varphi) = m\hbar\psi(r, \theta, \varphi) \quad (I - 40)$$

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

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_m^l(r, \theta, \varphi) \quad (I - 41)$$

En utilisant le fait que :

$$\begin{aligned} L^2\psi(r, \theta, \varphi) &= L^2R(r)Y_m^l(r, \theta, \varphi) \\ &= R(r)L^2Y_m^l(r, \theta, \varphi) \\ &= l(l+1)\hbar^2R(r)Y_m^l(r, \theta, \varphi) \end{aligned} \quad (I - 42)$$

on aboutit à l'équation radiale suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m r^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r) \quad (I - 43)$$

d'où :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}) \right] R(r) = 0 \quad (I - 44)$$

À cause de l'interprétation probabiliste due à M. Born en 1926 [10] des fonctions d'onde, les solutions de l'équation de Schrödinger doivent appartenir à l'espace de Hilbert. En plus de l'équation de Schrödinger, les solutions de cette dernière doivent vérifier l'équation de continuité suivante [2] :

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = 0 \quad (I - 45)$$

avec

$$\rho(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t)^* \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I} - 46)$$

Représente la densité de probabilité et

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}, t)] \quad (\text{I} - 47)$$

est le vecteur de la densité de courant.

Dans la littérature, la solution analytique de l'équation de Schrödinger stationnaire a été trouvée seulement pour quelques systèmes physiques comme l'atome d'hydrogène, oscillateur harmonique simple..., alors que la plupart des autres potentiels ont été résolus soit par des méthodes approximatives (la méthode de perturbation, la méthode variationnelle), ou par des méthodes numériques (la méthode d'Euler, la méthode de Hann,...).

4-Les méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire

4.1-Méthodes numériques

On cite par exemple :

- Méthode d'Euler
- Heun
- Euler améliorée
- Rung et Kutta
- Approximations successives [11].

4.2-Méthodes analytiques

4.2.1- la méthode de perturbation

a -Principe de la méthode

Cette méthode s'applique dans le cas d'un système stationnaire ou l'Hamiltonien est écrit sous la forme [12] :

$$H = H_0 + W \quad (\text{I} - 48)$$

où H_0 est un opérateur indépendant du temps et dont on connaît les valeurs propres et les états propres et W est un opérateur dont les éléments de matrice dans une représentation données sont petits par rapport à ceux de H_0 .

H_0 est appelé « hamiltonien non perturbé » et W est appelé « perturbation » . Si W ne dépend pas du temps, la perturbation est dite stationnaire.

Pour assurer que W est plus petit que H_0 on introduit un paramètre réel λ , que l'on l'impose d'être ($\lambda \ll 1$), ce qui permet d'écrire :

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V \quad (\text{I} - 49)$$

V est de l'ordre de H_0 .

Pour $\lambda = 0$, $H(\lambda)$ coïncide avec l'hamiltonien non perturbé H_0 .

Les valeurs propres et les vecteurs propres $E(\lambda)$ et $|\psi(\lambda)\rangle$ de $H(\lambda)$ dépendent en général de λ .

Dans cette méthode, nous allons résoudre de manière approchée l'équation aux valeurs propres de $H(\lambda)$ en développant les énergies et les états propres de $H(\lambda)$ en série de puissance du paramètre λ qu'on appellera paramètre de perturbation.

a.1-Valeurs propres de $H(\lambda)$

L'équation aux valeurs propres de $H(\lambda)$ s'écrit :

$$H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle \quad (\text{I} - 50)$$

En remplaçant $H(\lambda)$ par l'expression (1-49), l'équation (1-50) devient:

$$(H_0 + \lambda V)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle \quad (\text{I} - 51)$$

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

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda \varepsilon_1 + \lambda^2 \varepsilon_2 + \dots + \lambda^p \varepsilon_p + \dots = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \varepsilon_p \quad (\text{I} - 52)$$

et

$$|\psi(\lambda)\rangle = |\psi^0\rangle + \lambda |\psi^1\rangle + \dots + \lambda^p |\psi^p\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\psi^p\rangle \quad (\text{I} - 53)$$

Nous reportons ces développements dans l'équation (1-51), on obtient :

$$(H_0 + \lambda V) \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\psi^p\rangle \right) = \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \varepsilon_p \right) \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\psi^p\rangle \right) \quad (\text{I} - 54)$$

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

Pour les termes d'ordre 0 : (λ^0)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |\psi^0\rangle = 0 \quad (\text{I} - 55)$$

Pour les termes d'ordre 1: (λ^1)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |\psi^1\rangle + (W - \varepsilon_1) |\psi^0\rangle = 0 \quad (\text{I} - 56)$$

Pour les termes d'ordre 2: (λ^2)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |\psi^2\rangle + (W - \varepsilon_1) |\psi^1\rangle - \varepsilon_2 |\psi^0\rangle = 0 \quad (\text{I} - 57)$$

$$(H_0 - \varepsilon_0) |\psi^p\rangle + (W - \varepsilon_1) |\psi^{p-1}\rangle - \varepsilon_2 |\psi^{p-2}\rangle - \dots - \varepsilon_p |\psi^0\rangle = 0 \quad (\text{I} - 58)$$

On négligeant dans le développement de $E(\lambda)$, et $|\psi(\lambda)\rangle$ les termes d'ordre supérieur à 2 c'est-à-dire on se limitera en fait aux trois premières équations.

b-La correction d'énergie

On a trouvé la correction à l'énergie d'ordre 1 jusqu' à l'ordre 2 par la projection des équations de perturbation (1-54) sur l'état $|\psi^0\rangle$ qui donne en tenant compte .

$$\langle \psi^0 | \psi^0 \rangle = 1 \quad (\text{I} - 59)$$

La correction au premier ordre à l'énergie non dégénéré est égale à la valeur moyenne de la perturbation W dans l'état non-perturbé $|\phi_n\rangle$, Donc :

$$\varepsilon_1 = \langle \psi^0 | V | \psi^0 \rangle = \langle \phi_n | V | \phi_n \rangle \quad (\text{I} - 60)$$

avec:

$$H_0 |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad (\text{I} - 61)$$

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

$$\varepsilon_2 = \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{\langle \phi_n | V | \phi_m^\alpha \rangle}{E_n - E_m} \quad (\text{I} - 62)$$

b.1-La correction au vecteur propre

La correction au 1^{er} ordre du vecteur propre est une superposition linéaire de tous les états non perturbés autre que $|\phi_n\rangle$. cette correction s'écrit sous la forme:

$$|\psi^1 \rangle = \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{\langle \phi_n | V | \phi_m^\alpha \rangle}{E_n - E_m} |\phi_m \rangle \quad (\text{I-63})$$

La correction au 2^{ème} ordre est:

$$|\psi^2 \rangle = \sum_{m \neq p} \sum_{n \neq p} \left(C_n \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_p - E_m} - \frac{C_m \langle \phi_p | W | \phi_p \rangle}{E_p - E_m} \right) |\phi_m \rangle - \frac{1}{2} \sum_n |C_n|^2 |\phi_p \rangle \quad (\text{I-64})$$

avec:

$$C_n = \frac{\langle \phi_n | V | \phi_p \rangle}{E_p - E_m}$$

Les valeurs propres et les vecteurs propres de l'Hamiltonien perturbé H s'obtiennent en utilisant les développements (1-52) et (1-53). On obtient donc :

$$|\psi \rangle = |\phi_n \rangle + \sum_{\alpha} \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m^\alpha | V | \phi_n \rangle}{E_n - E_m} |\phi_m^\alpha \rangle + \dots \quad (\text{I-65})$$

et

$$E = E_n + \langle \phi_n | V | \phi_n \rangle + \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{\langle \phi_n | V | \phi_m^\alpha \rangle}{E_n - E_m} |\phi_m \rangle + \dots \quad (\text{I-66})$$

4.2-2- la méthode variationnelle

On sait que la méthode des perturbations stationnaire nécessite la connaissance des valeurs propres et des vecteurs propres associés au Hamiltonien non perturbé H_0 , mais quand on ne peut pas décomposer le hamiltonien total H du système en une partie principale H_0 et une perturbation W , ce qui rend la résolution de l'équation aux valeurs propres de H très difficile [12]. Dans ce cas, il nécessite de connaître l'énergie de l'état fondamental, donc pour résoudre ce problème on a alors recours à la méthode variationnelle [13], qu'est un outil d'approximation simple mais très utile dans de nombreux problèmes de physique quantique ou il est très difficile à connaître la solution exacte. Elle est basée sur des étapes mathématique que nous allons résumés comme suit [14].

a. principe de la méthode

Au début, en considérant un système physique de Hamiltonien H indépendant du temps et supposons que nous connaissons ses vecteurs propres $|\phi_n \rangle$ et les valeurs propres E_n associé à H où ses valeurs sont discrètes et non dégénérées (pour la simplification).

Donc on a:

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad (\text{I} - 67)$$

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

$$|\psi\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|\psi\rangle \quad (\text{I} - 68)$$

et : $E_0 \leq E_n$

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

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi|H|\psi\rangle}{\langle \psi|\psi\rangle} \quad (\text{I} - 69)$$

Si on remplace $|\psi\rangle$ par son expression nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle \psi|H|\psi\rangle &= \sum_n E_n |\langle \varphi_n|\psi\rangle|^2 \geq E_0 \sum_n |\langle \varphi_n|\psi\rangle|^2 \\ &= E_0 \langle \psi|\psi\rangle \end{aligned} \quad (\text{I} - 70)$$

La moyenne d'une série de nombre est plus grande que le plus petit des nombres de cette série où E_0 est la valeur propre la plus petite de H , donc :

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi|H|\psi\rangle}{\langle \psi|\psi\rangle} \geq E_0 \quad (\text{I} - 71)$$

qui désigne que quel que soit le choix de l'état $|\psi\rangle$, la valeur moyenne de l'énergie est toujours supérieure où égale à l'énergie de l'état fondamentale.



Chapitre II

L'équation de Schrödinger dépendante du temps

1. Introduction

Le sujet de cette partie est de décrire les différentes méthodes pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

Différentes méthodes existent pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Le choix d'une méthode particulière repose généralement sur la forme du potentiel et sur celle de la fonction d'onde recherchée. En pratique, il existe plusieurs techniques de résolutions. Le but est de trouver la solution $|\psi(t)\rangle$ correspondant à la condition initiale $|\psi(t_0)\rangle$ [4].

2-Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps

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

2.1. Méthodes approximatives

2.1.1. La théorie de perturbation

La théorie des perturbations constitue une de ces approximations. L'idée générale de la méthode est de dégager les effets principaux qui rendent compte globalement du comportement du système, et ensuite de détailler certaines quantités qui découlent d'effets secondaires moins importants [3].

Donc l'Hamiltonien du système s'écrit :

$$H(t) = H_0(t) + \lambda w(t) \quad (\text{II} - 1)$$

où $H_0(t)$ est un Hamiltonien d'une équation de Schrödinger que l'on sait intégrer exactement et $w(t)$ une fonction quelconque et λ vérifie: $\lambda \ll 1$.

Il est montré que :

$$U(t, t_0) = U^{(0)}(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t, t_0) \quad (\text{II} - 2)$$

avec $U^{(0)}(t, t_0)$ est la solution de l'équation non perturbée.

Les $U^{(n)}(t, t_0), \forall n > 1$ sont données par

$$U^{(n)}(t, t_0) = (i\hbar)^{-n} \lambda^n \int_{t > t_n > t_{n-1} > \dots > t_0} dt_n dt_{n-1} \dots dt_1 U^{(0)}(t, t_n) w(t_n) U^{(0)}(t_n, t_{n-1}) w(t_{n-1}) \dots U^{(0)}(t_2, t_1) w(t_1) U^{(0)}(t_1, t_0) \quad (\text{II-3})$$

Cette théorie consiste à ne prendre que les premiers ordres de λ .

La théorie des perturbations dépendante du temps permet donc de calculer approximativement les fonctions d'ondes à partir des états stationnaires du système non perturbé [15], et les différentes grandeurs physiques sont obtenues en calculant les valeurs moyennes des opérateurs correspondants.

2.1.2- Méthode variationnelle

Cette méthode s'appuie sur le théorème de Ritz . qui stipule que la valeur moyenne de l'Hamiltonien calculé par rapport à une fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$, c'est-à-dire :

$$\langle H(t) \rangle = \frac{\langle \psi(t) | H(t) | \psi(t) \rangle}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle} \quad (\text{II} - 4)$$

est stationnaire si elle avoisine l'une de ces valeurs propres. Alors, pour trouver les valeurs propres de l'Hamiltonien on choisit une fonction d'essai appropriée dépendante d'un certain paramètre α , et en variant par rapport au paramètre les valeurs propres de l'Hamiltonien correspondent aux valeurs α_i pour lesquelles la valeur moyenne est extrémale [4] .

2.1.3- L'approximation soudaine

Dans le cas extrême où l'hamiltonien du système varie subitement avec le temps on parle d'approximation soudaine, c'est-à-dire on appelle approximation soudaine, l'approximation appliquée dans le cas limite, elle s'énonce comme suit [4] : « . . . A la limite où, c'est-à-dire dans le cas du passage infiniment rapide, l'état dynamique du système reste inchangé . . . » . C'est-à-dire l'opérateur d'évolution vérifie :

$$\lim_{T \rightarrow 0} U(T + t_0, t_0) = 1.$$

2.1.4-L'approximation adiabatique

Dans l'autre cas extrême où l'hamiltonien du système varie lentement avec le temps, c'est-à-dire $T \rightarrow +\infty$; on parle de l'une des méthodes les plus puissantes en mécanique quantique : l'approximation adiabatique. Parmi l'une des résultats de ces applications dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps : la phase de Berry où phase géométrique. Á travers ce dernier on peut donner aux lecteurs une interprétation sur le rôle de l'approximation adiabatique dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps [4].

2.2 - Méthodes exactes

2.2.1- Transformations unitaires

Il est important de se rappeler que pour décrire l'évolution du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ dans l'espace de Hilbert, on doit choisir un système d'axes ou un référentiel.

Le choix de référentiel n'a pas de raison d'être unique, c'est-à-dire que l'on est libre de passer à un autre système d'axes. Chaque fois que l'on change de référentiel, on change de point de vue et par conséquent on observe le système physique sous un angle différent. En pratique, pour passer d'un référentiel à un autre, on utilise des opérateurs unitaires U qui peuvent être indépendants ou dépendants du temps et qui satisfont la condition [4] :

$$U^\dagger U = U U^\dagger = 1 \quad (\text{II} - 5)$$

où U^\dagger est l'opérateur adjoint de U . Généralement, pour un hamiltonien dépendant du temps, on utilise des opérateurs unitaires dépendants du temps qui transforment le vecteur d'état de la façon suivante :

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = U^{-1} |\psi(t)\rangle$$

Dans le nouveau référentiel, le nouvel hamiltonien s'écrit :

$$\tilde{H}(t) = U(t)^{-1} H(t) U(t) - i\hbar U(t)^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U(t) \quad (\text{II} - 6)$$

Donc les transformations unitaires servent d'outils de recherche de nouvelles représentations. Par exemple, dans le nouveau référentiel, on aimerait être capable d'effectuer une séparation de variables entre la partie temporelle et la partie spatiale du vecteur d'état $|\tilde{\psi}(t)\rangle$. En d'autres termes, on cherche des opérateurs unitaires qui mettraient l'hamiltonien original $H(t)$ sous une forme factorisable, i.e :

$\tilde{H}(t) = \sum_n h_n(t) T_n$ où $\tilde{H}(t) = g(t)k$, où les T_n et k sont indépendants du temps. Dès lors, on pourrait intégrer analytiquement l'équation de Schrödinger impliquant $H(t)$ pour obtenir l'opérateur d'évolution temporelle dans le nouveau référentiel. Dans cet esprit, de nombreuses études dans la littérature de physique mathématique ont porté sur la recherche ou l'identification de systèmes, surtout atomiques, qui admettent une solution exacte dans un certain type de référentiel. Efthimou et Spector ont ainsi identifié des classes de systèmes qui

admettent une séparation exacte de variables espace/temps et ils ont donné aussi des transformations unitaires pour obtenir le nouveau référentiel dépendant du temps [4].

2.2.2- L'opérateur d'évolution

Du fait de la correspondance linéaire entre $|\psi(t_0)\rangle$ et $|\psi(t)\rangle$, il existe un opérateur linéaire $U(t, t_0)$ tel que [4]:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (\text{II} - 7)$$

Il est clair, d'après la formule ci-dessus, que le rôle de cet opérateur est de déterminer l'évolution de l'état à tout instant, pour cette raison il est appelé opérateur d'évolution. Dans le cas particulièrement simple où l'hamiltonien H du système ne dépend pas du temps, l'opérateur $U(t, t_0)$ a une forme simple:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \quad (\text{II} - 8)$$

Effectivement, en prenant la dérivée partielle par rapport au temps de la fonction (II-8) on obtient :

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

On note que l'équation (II-9) présente le même degré de difficulté que l'équation de Schrödinger, mais elle présente plus d'avantage lors de l'utilisation des méthodes d'approximation. L'opérateur d'évolution total peut être ainsi décomposé en un produit d'opérateurs d'évolutions temporelles infinitésimales :

$$U(t, t_0) = U(t, t_k)U(t_k, t_{k-1}) \dots \dots \dots U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) \quad (\text{II} - 10)$$

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

$$U(t, t_0) = \prod_{i=1}^N U_i(t_i, t_i - \Delta t) \quad (\text{II} - 11)$$

On en arrive à conclure que le mouvement d'un ensemble quantique peut être assimilé à une succession de transformations unitaires.

Un cas particulier de la transformation (II-8), ayant de multiples applications dans la théorie de diffusion des particules, est celui où l'état initial est fixé non pas pour $t_0 = 0$; mais pour $t_0 = -\infty$; et l'état final $|\psi(t)\rangle$ est considéré pour $t = +\infty$; l'éq (II-11) s'écrit alors :

$$|\psi(+\infty)\rangle = U(+\infty; -\infty)|\psi(-\infty)\rangle \quad (\text{II} - 12)$$

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

$$U = U(+\infty; -\infty) = \lim_{t \rightarrow +\infty, t_0 \rightarrow -\infty} U(t, t_0) \quad (\text{II} - 13)$$

Cet opérateur porte le nom de matrice de diffusion.

2.2.3- Changement de représentation

Jusqu'à présent un mode de description a été généralement employé ; il s'agissait de la description de Schrödinger. En réalité, elle n'est pas la seule représentation possible. En fait, il n'est pas toujours nécessaire de trouver la solution de l'équation de Schrödinger qui contient souvent trop d'information par rapport aux questions que l'on se pose et alors, l'intégration explicite de l'équation (II-9) [4],

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0) \quad (\text{II} - 14)$$

nécessite un effort inutile et excessif. Il est commode d'étudier ces phénomènes dépendants du temps dans des autres descriptions tels que la représentation de Heisenberg et la représentation interaction.

Dans la description de Heisenberg la dépendance par rapport au temps est transférée des vecteurs d'états aux observables. Bien entendu l'évolution du système ne peut plus être décrite à partir de la fonction d'onde, ce qui nous conduit à une équation d'évolution des opérateurs (A_H opérateur quelconque écrit en description de Heisenberg) :

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = [A_H(t), H(t)] + i\hbar \left(\frac{d}{dt} A_S(t) \right)_H \quad (\text{II} - 15)$$

La représentation d'interaction semble être une description intermédiaire entre la description de Schrödinger et celle de Heisenberg. Ces représentations sont strictement équivalentes, mais leur utilité réside dans le fait que certaines propriétés quantiques sont plus immédiatement apparentes dans l'une que dans l'autre.

2.2.4- La théorie des invariants

1-Introduction

Parmi les méthodes les plus puissantes et qui donnent des solutions exactes de l'équation de Schrödinger dépendante du temps, nous avons la méthode des invariants.

L'idée de base de la théorie des invariants est la dérivation de la relation entre les états propres de l'invariant et la solution de l'équation Schrödinger. On peut trouver une transformation de phase dépendante du temps pour chaque état propre d'un invariant telle que la fonction propre devient une solution de l'équation de Schrödinger, et la phase est déterminée en résolvant une simple équation différentielle du premier ordre.

2- Les invariants

On considère l'équation de Schrödinger suivante :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{II} - 16)$$

où H est l'hamiltonien du système, c'est un opérateur auto-adjoint explicitement dépendant du temps [15].

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

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I, H] = 0 \quad (\text{II} - 17)$$

$$I^+(t) = I(t) \quad (\text{II} - 18)$$

En appliquant l'équation (17) sur $|\psi(t)\rangle$ et en utilisant l'équation (16), nous obtenons :

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} [I, H(t)] |\psi(t)\rangle = 0 \quad (\text{II} - 19)$$

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\psi(t)\rangle + IH(t)|\psi(t)\rangle - H(t)I|\psi(t)\rangle = 0 \quad (\text{II} - 20)$$

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\psi(t)\rangle + Ii\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle - H(t)I|\psi(t)\rangle = 0 \quad (\text{II} - 21)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (I|\Psi\psi(t)\rangle) = H(t)(I|\psi(t)\rangle) \quad (\text{II} - 22)$$

Cela veut dire que l'opérateur vérifie une solution de l'équation de Schrödinger, sur une autre solution de cette même équation. Ce résultat est valide pour tout invariant [15].

2-1- Propriétés de l'invariant

a- Valeurs propres de l'invariant I

On suppose que l'invariant a un ensemble complet de fonctions propres, on note les valeurs propres de part, et les états propres orthonormés associés d'autre part, où on représente tous les autres nombres quantiques nécessaires pour spécifier les états propres de ce système.

L'équation aux valeurs propres s'écrit comme suit [16] :

$$I(t) | \varphi_{\lambda k} \rangle = \lambda | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II} - 23)$$

Avec le produit hermitien sur l'espace des états :

$$\langle \varphi_{\lambda k} | \varphi_{\lambda' k'} \rangle = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{kk'} \quad (\text{II} - 24)$$

Cet invariant, a un spectre constant au cours du temps, c'est à dire que les valeurs propres de cet opérateur, sont indépendantes du temps.

En dérivant l'équation(23) par rapport au temps, on obtient:

$$\frac{\partial}{\partial t} (I(t) | \varphi_{\lambda k} \rangle) = \frac{\partial}{\partial t} (\lambda | \varphi_{\lambda k} \rangle) \quad (\text{II} - 25)$$

$$\frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + I \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + \lambda \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-26})$$

On applique l'équation(17) sur les états propres : $| \varphi_{\lambda k} \rangle$

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + \frac{1}{i\hbar} [I, H(t)] |\varphi_{\lambda k}\rangle = 0 \quad (\text{II} - 27)$$

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + IH |\varphi_{\lambda k}\rangle - \lambda H |\varphi_{\lambda k}\rangle = 0 \quad (\text{II} - 28)$$

Le produit scalaire de l'équation (28) par $\langle \varphi_{\lambda' k'} |$ donne :

$$\langle \varphi_{\lambda' k'} | i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + \langle \varphi_{\lambda' k'} | IH |\varphi_{\lambda k}\rangle - \langle \varphi_{\lambda' k'} | \lambda H |\varphi_{\lambda k}\rangle = 0 \quad (\text{II} - 29)$$

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + \lambda \langle \varphi_{\lambda' k'} | H |\varphi_{\lambda k}\rangle - \lambda \langle \varphi_{\lambda' k'} | H |\varphi_{\lambda k}\rangle = 0 \quad (\text{II} - 30)$$

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + (\lambda' - \lambda) \langle \varphi_{\lambda' k'} | H |\varphi_{\lambda k}\rangle = 0 \quad (\text{II} - 31)$$

Pour : $\lambda' = \lambda$

$$\langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = 0 \quad (\text{II} - 32)$$

En prenant le produit scalaire de l'équation (28) avec l'état propre $\langle \varphi_{\lambda k} |$, on obtient

$$\langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + \langle \varphi_{\lambda k} | I \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = \langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + \lambda \langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 33)$$

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

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

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

on a :

$$\langle \varphi_{\lambda k} | \varphi_{\lambda k}\rangle = \delta_{\lambda\lambda} \delta_{kk} = 1 \quad (\text{II} - 37)$$

alors :

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 38)$$

ce qui implique :

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = 0 \quad (\text{II} - 39)$$

b- Les vecteurs propres de I

Pour trouver le rapport entre les vecteurs propres et les solutions de l'équation du Schrödinger, on écrit d'abord l'équation du mouvement de $|\varphi_{\lambda k}\rangle$ [16].

En commençant par l'équation (26) et en utilisant l'équation (39), on obtient :

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + I \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + \lambda \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 40)$$

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + I \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = \lambda \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 41)$$

$$(\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 42)$$

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

$$\langle \varphi_{\lambda' k'} | (\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = \langle \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 43)$$

$$(\lambda - \lambda') \langle \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = \langle \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 44)$$

On déduit que :

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + (\lambda - \lambda') \langle \varphi_{\lambda' k'} | H |\varphi_{\lambda k}\rangle = 0 \quad (\text{II} - 45)$$

donc :

$$i\hbar (\lambda - \lambda') \langle \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = (\lambda - \lambda') \langle \varphi_{\lambda' k'} | H |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 46)$$

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

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = \langle \varphi_{\lambda' k'} | H |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 47)$$

Si l'équation (46) est valable pour $\lambda = \lambda'$ aussi bien que pour $\lambda \neq \lambda'$, alors on déduit immédiatement que $|\varphi_{\lambda k}\rangle$ satisfait l'équation de Schrödinger, c'est-à-dire, $|\varphi_{\lambda k}\rangle$ est une solution particulière de l'équation de Schrödinger.

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

Alors:

$$|\varphi_{\lambda k}\rangle_{\alpha} = e^{i\alpha(t)\lambda k} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 48)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle_{\alpha} = H |\varphi_{\lambda k}\rangle_{\alpha} \quad (\text{II} - 49)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{i\alpha(t)\lambda k} |\varphi_{\lambda k}\rangle) = H e^{i\alpha(t)\lambda k} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 50)$$

$$i\hbar \frac{\partial e^{i\alpha(t)\lambda k}}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle e^{i\alpha(t)\lambda k} = H e^{i\alpha(t)\lambda k} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 51)$$

$$-\hbar \frac{\partial \alpha(t)\lambda k}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = H |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 52)$$

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

$$-\hbar \frac{\partial \alpha_{\lambda k}}{\partial t} \langle \varphi_{\lambda' k'} | \varphi_{\lambda k} \rangle + \langle \varphi_{\lambda' k'} | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle = \langle \varphi_{\lambda' k'} | H | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II} - 53)$$

$$\hbar \frac{\partial \alpha_{\lambda k}}{\partial t} \langle \varphi_{\lambda' k'} | \varphi_{\lambda k} \rangle = \langle \varphi_{\lambda' k'} | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II} - 54)$$

$$\hbar \frac{\partial \alpha_{\lambda k}}{\partial t} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{kk'} = \langle \varphi_{\lambda' k'} | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II} - 55)$$

donc on obtient :

$$\hbar \frac{\partial \alpha_{\lambda k}}{\partial t} = \langle \varphi_{\lambda k} | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II} - 56)$$

Mise à part ces changements de phase, on peut introduire la deuxième propriété importante de cet invariant : tous les états propres de ces invariants sont aussi les solutions particulières de l'équation du Schrödinger (II.16).

c- Solution générale

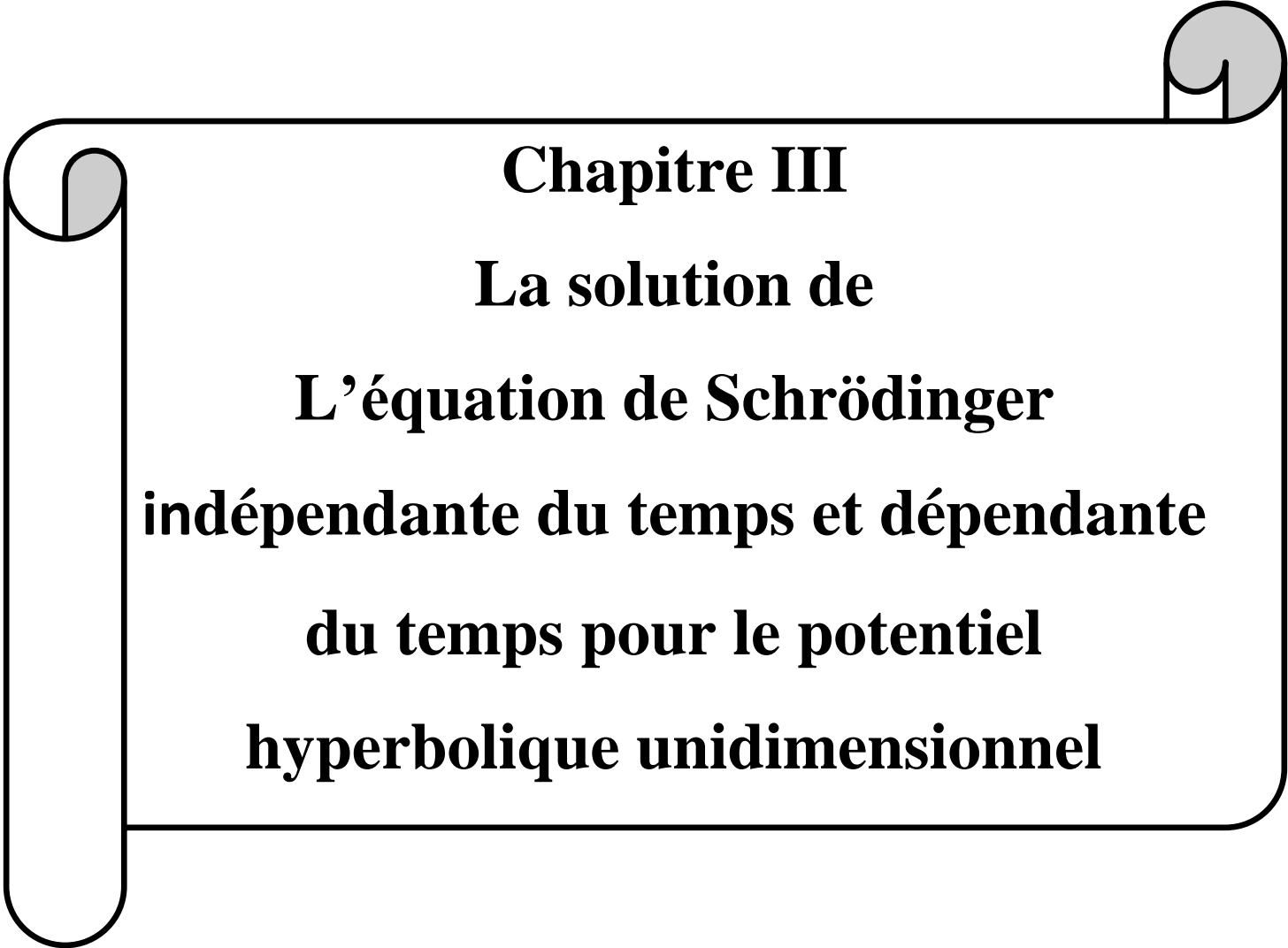
Du fait que chacun de ces nouveaux états propres satisfait l'équation de Schrödinger, la solution générale est donnée par [16] :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\lambda k} C_{\lambda k} e^{i\alpha(t)\lambda k} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 57)$$

où $C_{\lambda k}$ sont des coefficients indépendants du temps et correspondent à $|\psi(0)\rangle$.

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{\lambda k} C_{\lambda k} e^{i\alpha(0)\lambda k} |\varphi(0)_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II} - 58)$$

Donc, $|\psi(t)\rangle$ est la solution générale de l'équation de Schrödinger et sont les états propres de l'invariant.



Chapitre III
La solution de
L'équation de Schrödinger
indépendante du temps et dépendante
du temps pour le potentiel
hyperbolique unidimensionnel

1-Introduction

Le potentiel hyperbolique qui s'appelle le potentiel de poschl-Teller décrit la vibration moléculaire diatomique [6]. Pour le potentiel hyperbolique stationnaire, on applique la méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U) [7] pour réduire l'équation différentielle du deuxième degré à une équation différentielle de type hypergéométrique. Enfin, on obtiendra la forme finale des fonctions d'onde en termes du polynômes de Jacobi. Alors que pour le potentiel hyperbolique dépendant du temps qui n'est pas étudié dans la littérature, on utilise la méthode de séparation des variables et la méthode (N-U), on obtiendra les fonctions d'onde correspondantes aussi en termes du polynômes de Jacobi.

Notre but principal dans ce travail est de résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire et non stationnaire pour le potentiel hyperbolique unidimensionnel.

2-l'équation de Schrödinger

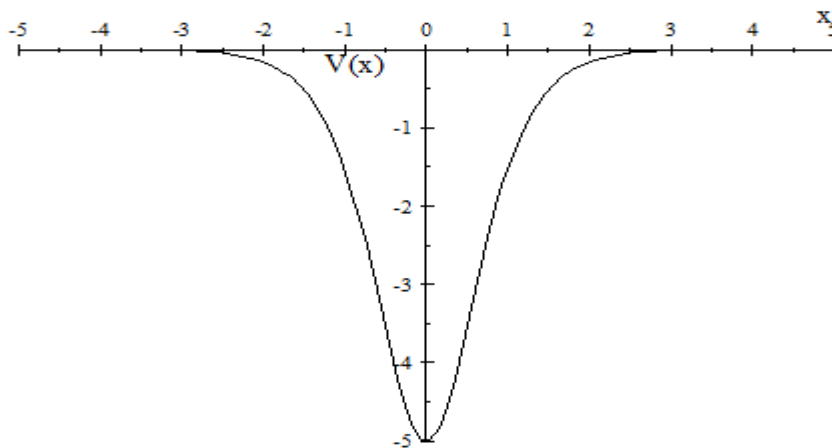
2-1-La solution de l'équation de Schrödinger stationnaire

Le potentiel hyperbolique indépendant du temps unidimensionnel est donné par:

$$V(x) = -\frac{V_0}{ch^2 \alpha x} \quad (\text{III-1})$$

où V_0 et α sont des constants.

Dans la figure au dessous, le potentiel hyperbolique est représenté graphiquement pour $V_0 = 5$, $\alpha = 1.2$.



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

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

On pose : $y = thax$, on obtient l'équation différentielle suivante:

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} - \frac{2y}{1-y^2} \frac{d}{dy} + \frac{2m}{\hbar^2\alpha^2} \frac{1}{(1-y^2)^2} (E + V_0 - V_0y^2) \right] \Psi(y) = 0 \quad (\text{III} - 3)$$

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

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

Cette équation a la forme de l'équation suivante:

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1 - \alpha_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{s^2(1 - \alpha_3 s)^2} \right] \psi(s) = 0 \quad (\text{III} - 5)$$

Pour résoudre cette équation, on utilise la méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U) [7].

2-1-1- La Méthode (N-U)

La méthode (N-U) [7] a été proposée et appliquée pour réduire l'équation différentielle du second ordre à l'équation de type hypergéométrique par une transformation appropriée de coordonnées $s = s(t)$ comme suit :

$$\psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} \psi(s) = 0 \quad (\text{III} - 6)$$

où $\sigma(s)$ et $\tilde{\sigma}(s)$ sont des polynômes de degré non supérieur à 2, et $\tilde{\tau}(s)$ est un polynôme d'ordre non supérieur à 1. Si nous prenons la factorisation :

$$\psi(s) = \emptyset(s)y(s) \quad (\text{III} - 7)$$

L'Eq. (III-6) devienne :

$$\sigma(s)y''(s) + \tau(s)y'(s) + \nu y(s) = 0 \quad (\text{III} - 8)$$

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

$$\frac{\phi(s)'}{\phi(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \quad (\text{III} - 9)$$

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

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

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

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho \quad (\text{III} - 11)$$

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

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

$$\nu = k + \pi' \quad (\text{III} - 13)$$

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

$$\nu = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma'' \quad (\text{III} - 14)$$

où

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) \quad (\text{III} - 15)$$

et son dérivé est négatif.

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

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1 - \alpha_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{s^2(1 - \alpha_3 s)^2} \right] \psi(s) = 0 \quad (\text{III} - 16)$$

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

$$\tilde{\tau} = \alpha_1 - \alpha_2 s \quad (\text{III} - 17)$$

et

$$\sigma = s(1 - \alpha_3 s) \quad (\text{III} - 18)$$

et aussi

$$\tilde{\sigma} = -\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3 \quad (\text{III} - 19)$$

En substituent ceux-ci dans l'Eq. (III-12)

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

où

$$\alpha_4 = \frac{1}{2}(1 - \alpha_1) \quad (\text{III} - 21)$$

$$\alpha_5 = \frac{1}{2}(\alpha_2 - 2\alpha_3) \quad (\text{III} - 22)$$

$$\alpha_6 = \alpha_5^2 + \xi_1 \quad (\text{III} - 23)$$

$$\alpha_7 = 2\alpha_4\alpha_5 - \xi_2 \quad (\text{III} - 24)$$

$$\alpha_8 = \alpha_4^2 + \xi_3 \quad (\text{III} - 25)$$

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

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

où, nous définissons

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

Pour chaque K les fonctions π sont obtenues. Pour

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

π devienne

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

Pour le même K , pour Eqs. (III-15), (III-17) et (III-20)

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

et

$$\tau' = -(\alpha_2 - 2\alpha_5) - 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) = -2\alpha_3 - 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) < 0 \quad (\text{III} - 31)$$

sont obtenues. Quant l'Eq. (III-13) est utilisée avec l'Eq. (III-14) et l'Eq. (III-31) l'équation suivante est dérive:

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

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

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

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

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

est obtenue, ou,

$$\alpha_{10} = \alpha_1 + 2\alpha_4 + 2\sqrt{\alpha_8} \quad (\text{III} - 35)$$

et

$$\alpha_{11} = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) \quad (\text{III} - 36)$$

et $P_n^{(\alpha, \beta)}$ sont les polynômes de Jacobi. Utilisant l'Eq. (III-9)

$$\phi(s) = s^{\alpha_{12}} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} \quad (\text{III} - 37)$$

est obtenue et le la solution générale devienne

$$\psi = \phi(s)y(s) \quad (\text{III} - 38)$$

$$\psi = s^{\alpha_{12}} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} P_n^{(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1)}(1 - 2\alpha_3 s) \quad (\text{III} - 39)$$

Ici, les fonctions alpha sont données par :

$$\alpha_{12} = \alpha_4 + \sqrt{\alpha_8} \quad (\text{III} - 40)$$

et

$$\alpha_{13} = \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) \quad (\text{III} - 41)$$

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

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} P_n^{(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1)} (1 - 2\alpha_3 s) = L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11} s) \quad (\text{III} - 42)$$

et

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} = e^{\alpha_{13} s} \quad (\text{III} - 43)$$

La solution donnée dans l'Eq. (III-40) devienne

$$\psi = s^{\alpha_{12}} e^{\alpha_{13} s} L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11} s) \quad (\text{III} - 44)$$

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

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8) + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} \quad (\text{III} - 45)$$

Cette solution devienne

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

et le spectre d'énergie est

$$\alpha_2 n - 2n\alpha_5 + (2n + 1)(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) + n(n - 1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} + \alpha_5 = 0 \quad (\text{III-47})$$

Les paramètres prédéfinis alpha sont les suivants :

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

$$\alpha_{11}^* = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \quad (\text{III} - 49)$$

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

$$\alpha_{13}^* = \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \quad (\text{III} - 51)$$

Les paramètres ξ_i et α_i de notre système sont :

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

$$\alpha_1 = \frac{1}{2} \quad , \quad \alpha_2 = \frac{3}{2} \quad , \quad \alpha_3 = 1 \quad , \quad \alpha_4 = \frac{1}{4} \quad ; \quad \alpha_5 = -\frac{1}{4} \quad , \quad \alpha_6 = \frac{1}{16} + \frac{mV_0}{2\hbar^2 \alpha^2} \quad (\text{III} - 53)$$

$$\alpha_7 = -\frac{mV_0}{2\hbar^2\alpha^2}(E + V_0) - \frac{1}{8}, \quad \alpha_8 = \frac{1}{16}, \quad \alpha_9 = -\frac{m}{2\hbar^2\alpha^2}E, \quad \alpha_{10} = \frac{3}{2}, \quad \alpha_{11} = \frac{5}{2} + 2\sqrt{\frac{-mE}{2\hbar^2\alpha^2}}, \quad \alpha_{12} = \frac{1}{2}, \quad \alpha_{13} = -\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{-mE}{2\hbar^2\alpha^2}} \quad (\text{III} - 54)$$

a- Le spectre d'énergie

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

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

b- La fonction d'onde

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

$$\psi(x) = A_n t h \alpha x (1 - t h^2 \alpha x) \sqrt{\frac{-mE}{2\hbar^2\alpha^2}} P_n^{\left(\frac{1}{2}, 2\sqrt{\frac{-mE}{2\hbar^2\alpha^2}}\right)} (1 - 2t h^2 \alpha x) \quad (\text{III} - 56)$$

telle que :

A_n : la constante de normalisation qui se détermine à partir de la condition : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$.

On pose : $z = 1 - 2t h^2 \alpha x$ et on utilisant l'intégral par partie et la propriété suivante des polynômes de Jacobi :

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

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

on trouve :

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

2-2- L'équation de Schrödinger non stationnaire

Dans cette partie de notre travail, on va étudier le mouvement quantique du potentiel hyperbolique non stationnaire à une dimension.

On utilise la méthode de séparation des variables pour trouver les fonctions d'onde exactes et le spectre d'énergie pour notre système.

Nous nous intéressons à la solution de l'équation de Schrödinger pour une particule plongée dans un potentiel hyperbolique dépendant du temps à une dimension, $V(x, t) = -\frac{C(t)}{Ch^2\alpha x}$. L'hamiltonien de notre système est donné par:

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

avec $A(t)$ et $C(t)$ sont des fonctions dépendantes du temps. L'opérateur du moment conjugué est défini par $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, la position et l'impulsion vérifient la relation de commutation: $[x, p] = i\hbar$.

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

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

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

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

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

$$H = A(t) \left(p^2 - \frac{\gamma}{Ch^2\alpha x} \right) \quad (\text{III} - 62)$$

L'équation (III-60) devient:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = A(t) \left(p^2 - \frac{\gamma}{Ch^2\alpha x} \right) \psi(x, t) \quad (\text{III} - 63)$$

Nous prenons le changement de variable suivant:

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

par conséquent:

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

et

$$\Psi(x, t) = \Psi(x, s) \quad (\text{III} - 66)$$

Nous sommes ici conduits à l'équation de Schrödinger dépendante de la nouvelle variable s :

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

Remarquant qu'on peut séparer les variables (x, s) , donc on pose:

$$\Psi(x, s) = \phi(x)f(s) \quad (\text{III} - 68)$$

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

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

avec: $\varepsilon_n = \text{Const}$, et

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

est un hamiltonien indépendant du temps.

Donc, nous obtenons les deux équations suivantes:

$$H_0(x)\phi_n(x) = \varepsilon_n\phi_n(x) \quad (\text{III} - 71)$$

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

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

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

où C_n est la constantante de normalisation.

L'équation (III-71) devient:

$$\frac{d^2 \phi_n}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2} \left(\varepsilon_n + \frac{\gamma}{ch^2 \alpha x} \right) \phi_n = 0 \quad (\text{III} - 74)$$

Cette équation à la forme de l'équation (III-2), avec :

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

Donc, les valeurs propres de ϕ_n sont :

$$\varepsilon_n = -4\hbar^2 \alpha^2 \left[n + \frac{3}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\gamma}{\hbar^2 \alpha^2} + \frac{1}{4}} \right]^2, n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{III} - 76)$$

a- Le spectre d'énergie

Le spectre de notre hamiltonien (III-59) est donné par :

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

b-La fonction d'onde

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

$$\psi(x, t) = C_n e^{-\frac{i\varepsilon_n}{\hbar} \int_0^t A(t') dt'} th\alpha x (1 - th^2 \alpha x) \sqrt{\frac{-\varepsilon_n}{4\hbar^2 \alpha^2}} P_n^{\left(\frac{1}{2}, 2\sqrt{\frac{-\varepsilon_n}{4\hbar^2 \alpha^2}}\right)} (1 - 2th^2 \alpha x) \quad (\text{III-78})$$

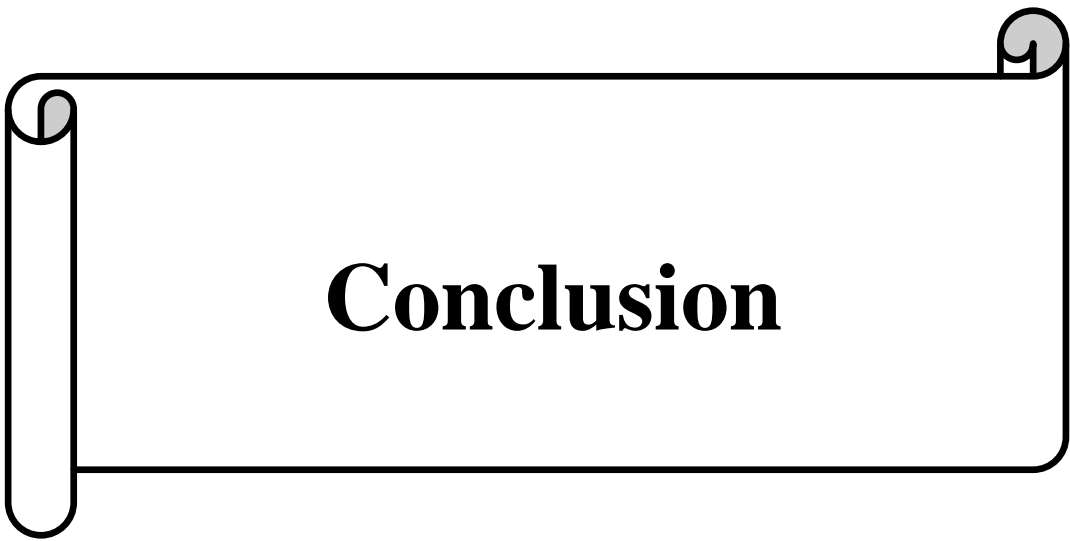
où C_n : est la constante de normalisation qui est donnée par :

$$C_n = \frac{\sqrt{n! \beta_1 \Gamma\left(\beta_1 + n + \frac{3}{2}\right)}}{\sqrt{\Gamma\left(n + \frac{3}{2}\right) \Gamma(\beta_1 + n + 1)}} \quad (\text{III} - 79)$$

$$\text{Avec : } \beta_1 = 2 \left(n + \frac{3}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\gamma}{\hbar^2 \alpha^2} + \frac{1}{4}} \right).$$

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

$\alpha' = 4\hbar^2 \alpha^2 \left[n + \frac{3}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\gamma}{\hbar^2 \alpha^2} + \frac{1}{4}} \right]^2 \int_0^t A(t') dt'$. Cette phase représente la phase dynamique, donc la phase de Berry est nulle.



Conclusion

Conclusion

En mécanique quantique, les systèmes stationnaires sont représentés par un hamiltonien indépendant du temps, alors que les systèmes non stationnaires sont représentés par un hamiltonien dépendant explicitement du temps. Ces systèmes sont difficiles à résoudre exactement, particulièrement la solution analytique de l'équation de Schrödinger.

Dans cette mémoire, on a résolu l'équation de Schrödinger unidimensionnelle pour le potentiel hyperbolique stationnaire et non stationnaire. Le potentiel hyperbolique décrit la vibration moléculaire diatomique. Pour le potentiel hyperbolique stationnaire, on applique la méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U) pour réduire l'équation différentielle du deuxième degré à une équation différentielle de type hypergéométrique. Enfin, on obtiendra la forme finale des fonctions d'onde en termes du polynômes de Jacobi. Alors que pour le potentiel hyperbolique dépendant du temps qui n'est pas étudié dans la littérature, on utilise la méthode de séparation des variables et la méthode (N-U), on obtiendra les fonctions d'onde correspondantes aussi en termes du polynôme de Jacobi.

Bibliographie

- [1] E. Schrödinger, "The non relativistic équation of the de Broglie waves," Ann. Physik 79(1926)361-376
- [2] C.C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, Mécanique Quantique-T1 et T2- Hermann, Paris, nouvelle édition revue, corrigée et augmentée 1977.
- [3] C. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique quantique T1 (Hermann, Paris, 1977).
- [4] S. Menouar, Thèse de Doctorat ès Sciences, (Université de Sétif, 2009).
- [5] H. R. Lewis ,JR ,J .M ath. Phys9, 1976-1986(1968). [6] : D.Çevik, M.Gadella.
- [6],S.Kuru,and J.Negro, phys.Lett. A 380 (2016)1600-1609.
- [7] C.Tezcan and R. Sever, Int.J.Theor.Phys 48(2009) 337.
- [8] D.Blokhintsev, Principe de mécanique quantique (1981).
- [9] L. Landau et E. Lifchitz, mécanique quantique, edition mir 1975.
- [10] M. Born, The Statistical Interpretation of Quantum Mechanics nobel Lecture, December 11, 1954.
- [11] L. Krache, Thèse de Doctorat, (Université de Sétif, 2010).
- [12] Boucheriha.H.'Introduction à la physique quantique'.Centre de publication universitaire : Tunis.(2002).
- [13] A.Messiah,Mécanique Quantique T1(Dunod,Paris,1995) nouvelle édition.
- [14] - Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics , Vol 1,2 .
- [15] A.M. Markov, Invariant and the Evolution of Nonstationnary Quantum Systems, (New York, 1989).
- [16] Lewis HR Jr and Riesenfeld WB 1969 J. Math.Phys. 10 1458.

المخلص:

في هذا العمل ، قمنا بحل معادلة شرودنجر أحادية البعد لكمون زائدي مستقر و غير مستقر. بالنسبة للكمون المستقر طبقنا طريقة نيكيفوروف ايفاروف لتحويل معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية الى معادلة تفاضلية من النوع فوق الهندسي. تحصلنا على الشكل النهائي لدوال الموجة ككثيرات حدود جاكوبي. بالنسبة للكمون المتعلق بالزمن استعملنا طريقة فصل المتغيرات و طريقة نيكيفوروف ايفاروف تحصلنا على دوال الموجة الموافقة ككثيرات حدود جاكوبي أيضا. **كلمات مفتاحية:** معادلة شرودنجر, طريقة نيكيفوروف ايفاروف, كمون زائدي.

Résumé :

Dans ce travail, on a résolu l'équation de Schrödinger unidimensionnelle pour le potentiel hyperbolique stationnaire et non stationnaire. Pour le potentiel hyperbolique stationnaire, on applique la méthode Nikiforov-Uvarov (N-U) pour réduire l'équation différentielle du deuxième degré à une équation différentielle de type hypergéométrique. Enfin, on obtiendra la forme finale des fonctions d'onde en termes du polynômes de Jacobi. Alors que pour le potentiel hyperbolique dépendant du temps qui n'est pas étudié dans la littérature, on utilise la méthode de séparation des variables et la méthode (N-U), on obtiendra les fonctions d'onde correspondantes aussi en termes du polynômes de Jacobi.

Mot clés : équation de Schrödinger, la méthode Nikiforov-Uvarov, le potentiel hyperbolique. potential.

Abstract:

In this work, we solved the one-dimensional Schrödinger equation for the stationary and non-stationary hyperbolic potential. For the stationary hyperbolic potential, the Nikiforov-Uvarov method is applied to reduce the second order differential equation to a hypergeometric differential equation. Finally, we obtain the final form of the wave functions in terms of the Jacobi polynomials. Whereas for the time-dependent hyperbolic potential that is not studied in the literature, we use the method of separation of variables and the (N-U) method, we obtain the corresponding wave functions also in terms of the Jacobi polynomials.

Key words: Schrödinger equation, Nikiforov-Uvarov method, hyperbolic potential.