



N° d'ordre :.....

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et
de la Recherche Scientifique

Université de M'sila
Faculté des Sciences
Département de Physique

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

MASTER

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

Option : **Physique des Particules à haute Energie**

Par

BELKAIBECH OUMELKHEIR

THEME

**La solution de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de
Morse dépendant du temps**

Soutenue le : 18/06/2014

Devant le jury composé de :

S. MENOVAR	M.C.A	Univ. de Sétif	Président
S. MEDJBER	M.A.A	Univ. de M'sila	Rapporteur
H. BEKKAR	M.C.A	Univ. de Sétif	Examineur

Promotion Juin 2014

Remerciements

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

*Je tiens, avant tout, à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur le Professeur: **Medjber Salim** , mon promoteur.*

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

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

Mes remerciements vont aussi à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la concrétisation de ce travail pour leurs conseils, leurs encouragements et leurs soutiens.

Mes remerciements vont également à tous les enseignants du département de physique et mes collègues de promotion Physique Master (2) de l'année 2013/2014.

Dédicace

*Je remercie le Bon-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, pour
leurs encouragement et leurs aide, et soutien
et surtout les sacrifices qu'ils ont fait pour
nous voir réussir.*

*Je le dédie aussi à mes frères et sœurs
A toute ma grande Famille **Belkaibech**
A tous mes amis et mes professeurs sans
exception*

*A tous ceux et celles qui m'ont aidé et
encouragé de près comme de loin, parmi eux:
l'enseignante Seffari Loubna.*

*A tous les enseignants de département de
Physique a l'université de M'sila.*

Table des matières

Introduction.....	04
--------------------------	-----------

Chapitre 01 : Equation de Schrödinger

1. Introduction.....	07
2. Construction de l'équation de Schrödinger.....	07
2.1. Naissance de l'équation	07
2.2. Propriétés de l'équation de Schrödinger.....	09
3. la fonction d'onde.....	10
4. solution de l'équation de Schrödinger.....	11
4.1. Introduction.....	11
4.2. L'équation de Schrödinger stationnaire.....	11
a. L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension.....	11
4.3. Les méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger	
Stationnaire.....	13
4.3.1. Méthodes numériques.....	13
4.3.2. Méthodes analytiques	13
a. la méthode de perturbation.....	13
b. la méthode variationnelle.....	16
4.2.2. L'équation de Schrödinger dépendante du temps.....	17
4.2.2.1. Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante	
du temps.....	17
a. méthodes approximatives.....	17
a.1 La théorie des perturbations.....	18
a.2 Méthode variationnelle.....	18

a.3 L'approximation soudaine.....	19
a.4 L'approximation adiabatique.....	19
b. Méthodes exactes	19
b.1. Transformations unitaires.....	19
b.2. La théorie des invariants.....	20
b.3. L'opérateur d'évolution.....	20
b.4. Changement de représentation.....	22

Chapitre 02 : La théorie des invariants

1. Introduction.....	24
2. les invariants.....	24
2.1. Propriétés des invariants.....	24
2.1.1. Les valeurs propres de l'invariant.....	24
2.1.2. Les vecteurs propres de l'invariant.....	26
2.2. Solution générale.....	27

Chapitre03 : Solution de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse dépendant du temps

- Introduction.....	29
1. La méthode (N-O).....	31
2. L'énergie.....	35
3. La fonction d'onde.....	35
Conclusion.....	37
Bibliographie.....	39

Introduction

Introduction :

La mécanique quantique est la branche qui a pour but d'étudier et décrire des phénomènes physiques. Elle est fondamentale dans pratiquement tous les domaines de la physique dès qu'on s'intéresse à des dimensions microscopiques de l'ordre du diamètre d'un atome, elle a permis de comprendre des nombreux phénomènes qui étaient sans explication. La mécanique quantique a été établie essentiellement entre 1900 et 1927 par Bohr, Dirac, De Broglie, Heisenberg, Gordan, Pauli et Schrödinger, sachant en mécanique classique (loi de Newton) l'état d'un système physique 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.

L'équation de Schrödinger joue un rôle fondamental en mécanique quantique car c'est elle qui régit l'évolution dans le temps du système physique. Depuis la publication des travaux de Schrödinger [1], les physiciens théoriciens se sont penchés à trouver des solutions analytiques à l'équation de Schrödinger pour différents systèmes physiques. A partir de cette solution, on obtient une fonction d'onde qui nous permet 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 (oscillateur harmonique, particule libre, atome d'Hydrogène,...) [2,3], et la plus part des autres cas sont restés sans solution, n'ont été résolus que par des méthodes numériques. Cependant pour les systèmes dépendant du temps on utilise les méthodes approximatives comme méthodes de perturbation, 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'Hamilton dépend des paramètres variants en fonction du temps.

La théorie des invariants a été introduite par Lewis et Riesenfeld (1969) [4], représente l'un des piliers fondamentaux dans l'étude des systèmes dépendants du temps, cette méthode est basée sur la construction d'un opérateur hermitien qui représente l'invariant I et la dérivation de la relation entre les états propres de l'invariant et la solution de l'équation de Schrödinger. L'importance de la théorie des invariants se figure dans le langage mathématique puissant et son efficacité dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

Parmi les potentiels non étudiés dans la littérature le potentiel de Morse, nommé d'après le physicien Philip Morse qui est introduit une forme analytique très importante d'énergie potentielle pour une molécule diatomique qui est définie par :

$$V(x, t) = V_1(t)e^{-2a(t)x} + V_2(t)e^{-a(t)x} .$$

Dans cette mémoire, on va résoudre l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse dépendant du temps pour un cas particulier ($a = \text{constant}$).

On va d'abord rappeler, au premier chapitre : L'équation de Schrödinger stationnaire (indépendant du temps) et dépendant du temps avec ses méthodes de solution. Le deuxième chapitre est consacré à la solution de l'équation de Schrödinger par la méthode des invariants. Dans le troisième chapitre on présente la solution de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse dépendant du temps.

Chapitre I

Equation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger :

1-Introduction :

L'équation de Schrödinger joue un rôle fondamental en mécanique quantique par analogue à l'équation de Newton en mécanique classique, car c'est elle qui régit l'évolution dans le temps du système physique.

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

2-Construction de l'équation de Schrödinger:

2.1-Naissance de l'équation :

Le 19ème siècle a connu l'apparition de l'une des deux grandes théories physiques du siècle ; la physique quantique. Tout au début de la mécanique quantique on a été confronté au problème de l'explication des états discrets d'un atome. En mécanique classique l'état d'un système physique 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. Cette équation a été proposée par E. Schrödinger en 1926. De Broglie et Schrödinger ont ainsi pu développer un parallélisme entre la mécanique classique et l'optique et parvenir à la conception de la mécanique ondulatoire [5].

L'équation de Schrödinger, trouvée par le physicien Erwin Schrödinger en 1925, est une équation d'onde qui généralise l'approche de De Broglie ci-dessus aux particules massives non-relativistes soumises à une force dérivant d'une énergie potentielle.

Le physicien autrichien Erwin Schrödinger 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 prenons la formule de l'onde plane de De Broglie :

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i(\vec{K}\vec{r} - \omega t)} \quad (\text{I-1})$$

Dans la suite il sera plus intéressant de considérer la pulsation ω et le nombre d'onde k , qui d'après les postulats ci-dessus, sont liés à la particule classique par

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

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

Alors:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{P}\vec{r} - Et)} \quad (\text{I-4})$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} E \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{P}\vec{r} - Et)} = -\frac{i}{\hbar} E \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I-5})$$

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

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 :

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

$$\vec{P} \psi(\vec{r}, t) = -i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I-9})$$

Donc:

$$\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (\text{I-10})$$

$\hat{p}$: L'opérateur d'impulsion.

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 apparait dans la formulation hamiltonienne pour une particule libre $U(\vec{r}) = 0$ de la mécanique classique.

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

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

Et pour l'impulsion :

$$\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (\text{I-13})$$

$$\frac{p^2}{2m} \psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{2m} (i\hbar \vec{\nabla})^2 \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I-14})$$

Donc l'équation de Schrödinger devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I-15})$$

Où $\Delta = \vec{\nabla}^2$ c'est laplacien.

L'opérateur hamiltonien du système pour une particule libre est :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \quad (\text{I-16})$$

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

$$\hat{H} \psi(\vec{r}, t) = E \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I-17})$$

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

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(r) \quad (\text{I-18})$$

Avec cette nouvelle valeur d'énergie et à partir de l'équation (7) et l'opérateur p , l'équation de Schrödinger devient

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right) \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I-19})$$

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \quad (\text{I-20})$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I-21})$$

2.2-Propriétés de L'équation de Schrödinger:

Cette équation est également linéaire et homogène. Ses solutions sont donc linéairement superposables. Si $|\psi_1(t)\rangle$ et $|\psi_2(t)\rangle$ sont deux solutions de l'équation et si l'état initial du système est défini par :

$|\psi(t_0)\rangle = \lambda_1 |\psi_1(t_0)\rangle + \lambda_2 |\psi_2(t_0)\rangle$, alors l'état du système au temps t est donné par $|\psi(t)\rangle = \lambda_1 |\psi_1(t)\rangle + \lambda_2 |\psi_2(t)\rangle$. Il existe donc une correspondance linéaire entre $|\psi(t_0)\rangle$ et $|\psi(t)\rangle$.

- ❖ Les équations de Schrödinger dépendantes du temps sont des équations différentielles du premier ordre par rapport au temps par conséquent, si on connaît ψ a un instant initial (x, t_0) on peut déterminer son évolution, ceci montre que l'état dynamique du système est entièrement déterminé par la fonction ψ .
- ❖ Si l'hamiltonien du système ne dépend pas du temps, la solution de l'équation de Schrödinger s'écrit sous la forme :

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (\text{I-22})$$

Avec $\psi(x)$ vérifie l'équation de Schrödinger stationnaire:

$$\hat{H} \psi(x) = E \psi(x) \quad (\text{I-23})$$

E : La valeur propre de l'hamiltonien.

Donc l'équation de Schrödinger indépendante du temps permet de trouver des états stationnaires parmi tous les états possibles du système qui est en effet un cas particulier d'une équation générale dépendante du temps qui donne l'évolution de la fonction d'onde quel que soit l'état du système.

3-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 à 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:

$$\int \psi^* \psi d^3r = \int |\psi|^2 d^3r = 1 \quad (\text{I-23})$$

Si $\psi(\vec{r}, t)$ est normée:

$$P = \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad (\text{I-24})$$

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

4-Solution de l'équation de Schrödinger:

4.1-Introduction:

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. L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la mécanique quantique. Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles qui décrit l'évolution au cours du temps de la fonction d'onde d'un système physique [6]. 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 et l'équation de Schrödinger dépendante du temps [7].

4.2-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'énergie totale E est conservée, donc l'équation de Schrödinger admet des solutions particulières sous forme :

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \varphi(\vec{r}) \quad (\text{I-25})$$

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

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)\right] \varphi(r) = E\varphi(r) \quad (\text{I-26})$$

Avec $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, où ∇ l'opérateur de dérivées partielles, en coordonnées cartésiennes est défini par :

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \quad (\text{I-27})$$

a-L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension :

Les problèmes à une dimension sont intéressants non seulement comme modèles simples permettant de mettre en évidence un certain nombre de propriétés que l'on retrouve dans les situations plus complexes, mais aussi parce que dans ces problèmes il est possible de se ramener après quelques manipulations adéquates à la résolution d'équation du même type que l'équation de Schrödinger à une dimension [8].

L'équation de Schrödinger est donnée par :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right] \psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) \quad (\text{I-28})$$

A cette mémoire, on s'intéresse à l'équation de Schrödinger à une dimension :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right] \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (\text{I-29})$$

Séparant les variables :

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \chi(t) \quad (\text{I-30})$$

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

$$\left(i\hbar \frac{d\chi}{dt}\right) \varphi(x) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + v(x)\varphi(x)\right\} \chi(t) \quad (\text{I-31})$$

Par conséquence :

$$\frac{i\hbar d\chi}{\chi dt} = \frac{\left\{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + v(x)\varphi(x)\right\}}{\varphi} \quad (\text{I-32})$$

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 :

$$\frac{i\hbar d\chi}{\chi dt} = E \quad (\text{I-33})$$

Et par conséquent :

$$\chi(t) = Ae^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (\text{I-34})$$

Tandis que :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + v(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (\text{I-35})$$

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

Donc

$$\psi(x, t) = Ae^{-\frac{iEt}{\hbar}} \varphi(x) \quad (\text{I-36})$$

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

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - v(x))\varphi(x) = 0 \quad (\text{I-37})$$

4.3-Les méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire :

4.3.1-Méthodes numériques :

On cite par exemple :

- méthode d'Euler
- Heun
- Euler améliorée
- Rung et Kutta
- approximations successives [5].

4.3.2-Méthodes analytiques

a-La méthode de perturbation

Pour un problème stationnaire ou non stationnaire, l'idée est de séparer le Hamiltonien en deux parties : $H = H_0 + w$ telle que l'on sache résoudre le problème pour H_0 , alors que w est considéré comme une petite correction. On appelle l'opérateur w la perturbation, H_0 : est appelée hamiltonien non perturbé . Si w ne dépend pas du temps, la perturbation est dite stationnaire. Cette méthode s'applique dans le cas du système stationnaire ou non stationnaire. L'hamiltonien est écrit sous la forme :

$$H = H_0 + w \quad (\text{I-38})$$

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 donnée 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 ($\lambda \ll 1$) ce qui permet d'installer progressivement la perturbation et on écrit alors :

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V \quad (\text{I-39})$$

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-La résolution de l'équation de perturbation aux valeurs propres

de $H(\lambda)$:

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

$$H(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle \quad (\text{I-40})$$

En remplaçant $H(\lambda)$ par l'expression (I-39) dans l'équation (I-40), il devient:

$$(H_0 + \lambda V) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle \quad (\text{I-41})$$

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:

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda \varepsilon_1 + \lambda^2 \varepsilon_2 + \dots + \lambda^p \varepsilon_p + \dots = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \varepsilon_p \quad (\text{I-42})$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |\psi^0\rangle + \lambda |\psi^1\rangle + \dots + \lambda^p |\psi^p\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\psi^p\rangle \quad (\text{I-43})$$

Nous reportons ces développements dans l'équation (I-41) on obtient :

$$(H_0 + \lambda V) \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\psi^p\rangle \right) = \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \varepsilon_p \right) \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\psi^p\rangle \right) \quad (\text{I-44})$$

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

Pour les termes d'ordre 0 : (λ^0)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |\psi^0\rangle = 0 \quad (\text{I-45})$$

Pour les termes d'ordre 1 : (λ^1)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |\psi^1\rangle + (V - \varepsilon_1) |\psi^0\rangle = 0 \quad (\text{I-46})$$

Pour les termes d'ordre 2 : (λ^2)

$$(H_0 - \varepsilon_0)|\psi^2\rangle + (V - \varepsilon_1)|\psi^1\rangle - \varepsilon_2|\psi^0\rangle = 0 \quad (\text{I-47})$$

Pour les termes d'ordre p: (λ^p)

$$(H_0 - \varepsilon_0)|\psi^p\rangle + (V - \varepsilon_1)|\psi^{p-1}\rangle - \varepsilon_2|\psi^{p-2}\rangle - \dots - \varepsilon_p|\psi^0\rangle = 0 \quad (\text{I-48})$$

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-1-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 (I-41) sur l'état $|\psi^0\rangle$ qui donne en tenant compte

$$\langle \psi^0 | \psi^0 \rangle = 1 \quad (\text{I-49})$$

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

$$\varepsilon_1 = \langle \psi^0 | V | \psi^0 \rangle = \langle \phi_n | V | \phi_n \rangle \quad (\text{I-50})$$

Avec :

$$H_0 |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$$

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

$$\varepsilon_2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_n | V | \phi_m \rangle|^2}{E_n - E_m} \quad (\text{I-51})$$

b-2-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:

$$|\psi^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | V | \phi_n \rangle|}{E_n - E_m} |\phi_m\rangle \quad (\text{I-52})$$

$$|\psi^2\rangle = \sum_{m \neq p} \sum_{n \neq p} (C_n \frac{\langle \phi_m | V | \phi_n \rangle}{E_p - E_m} - \frac{C_m \langle \phi_p | V | \phi_p \rangle}{E_p - E_m}) |\phi_m\rangle - \frac{1}{2} \sum_n |C_n|^2 |\phi_p\rangle \quad (\text{I-53})$$

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 (I-39) et (I-40). On obtient donc :

$$|\psi\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_n | w | \phi_m \rangle|^2}{E_n - E_m} |\phi_m\rangle + \dots \quad (\text{I-54})$$

Et

$$E = E_n + \langle \phi_n | w | \phi_n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_n | w | \phi_m \rangle|^2}{E_n - E_m} + \dots \quad (\text{I-55})$$

c-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 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. 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, qu'est un outil d'approximation simple et basée sur des étapes mathématiques que nous allons résumés comme suit:

-c-1- 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 :

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad (\text{I-56})$$

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

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\phi_n\rangle \quad (\text{I-57})$$

Où C_n représentent les coefficients du développement.

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

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (\text{I-58})$$

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

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \sum_n \sum_m C_m^* C_n \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle \\ &= \sum_n \sum_m C_m^* C_n \delta_{mn} = \sum_n |C_n|^2 \end{aligned}$$

Et

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_n \sum_m C_m^* C_n \langle \varphi_m | H | \varphi_n \rangle \\ &= \sum_n \sum_m C_m^* C_n E_n \delta_{mn} = \sum_n |C_n|^2 E_n \\ &\geq E_0 \sum_n |C_n|^2 = E_0 \langle \psi | \psi \rangle \end{aligned} \quad (\text{I-59})$$

Où E_0 est la valeur propre la plus petite de H , donc :

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (\text{I-60})$$

Qui désigne que quel que soit le choix de l'état $|\psi\rangle$, la valeur moyenne de l'énergie est toujours supérieure ou égale à l'énergie de l'état fondamentale. Cette égalité n'est obtenue que si tous les coefficients C_n sont nuls sauf C_0 , dans ce cas $|\psi\rangle = |\varphi_0\rangle$ et le vecteur d'état n'est autre que celui de l'état fondamental.

4.2.2- L'équation de Schrödinger dépendant du temps :

4.2.2.1-Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendant 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 $|\psi(t_0)\rangle$ [9].

a-Méthodes approximatives:

Parfois lorsqu'on ne peut pas trouver des résultats exactes, on utilise les méthodes d'approximation, ces méthodes sont généralement très puissantes et applicables.

a.1-La théorie des perturbations :

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 [2].

Donc l'Hamiltonien du système s'écrit :

$$H(t) = H_0(t) + \lambda w \quad (\text{I-61})$$

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 :

$$U(t, t_0) = U^{(0)}(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t, t_0) \quad (\text{I-62})$$

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

$$U^{(n)}(t, t_0) = (i\hbar)^{-n} \lambda^n \int_{t > t_n > t_{n-1} > \dots > t_0}^{\square} dt_n dt_{n-1} \dots dt_1 U^{(0)}(t, t_n) w(t_n) U^{(0)}(t_n, t_{n-1}) w(t_{n-1}) \dots U^{(0)}(t_2, t_1) w(t_1) U^{(0)}(t_1, t_0) \quad (\text{I-63})$$

Cette théorie consiste à ne prendre que les premiers ordres 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 perturbés [7], et les différentes grandeurs physiques sont obtenues en calculant les valeurs moyennes des opérateurs correspondants.

a.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 :

$$\langle H(t) \rangle = \frac{\langle \psi(t) | H(t) | \psi(t) \rangle}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle} \quad (\text{I-64})$$

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 .

a.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 [10] : « . . . 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 :

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

a.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. À 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 [10].

b -Méthodes exactes :

b.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 [10] :

$$U^+ U = U U^+ = 1 \quad (\text{I-65})$$

où U^+ 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 :

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = U^{-1} |\psi(t)\rangle \quad (\text{I-66})$$

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

$$\tilde{H}(t) = U(t)^{-1} H(t) U(t) - i\hbar U(t)^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U(t) \quad (\text{I-67})$$

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 [10].

b.2- La théorie des invariants :

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 [10].

A cause de son importance dans ce travail, nous allons l'étudier avec plus de détails dans le second chapitre.

b.3- 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 [10]:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (\text{I-68})$$

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:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \quad (\text{I-69})$$

Effectivement, en prenant la dérivée partielle par rapport au temps de la fonction (I-69) on obtient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = HU(t, t_0) \quad (\text{I-70})$$

On note que l'équation (I-69) 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 :

$$U(t, t_0) = U(t, t_k)U(t_k, t_{k-1}) \dots \dots \dots U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) \quad (\text{I-71})$$

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 :

$$U(t, t_0) = \prod_{i=1}^N U_i(t_i, t_i - \Delta t) \quad (\text{I-72})$$

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 (I-69), 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 (I-72) s'écrit alors :

$$|\psi(+\infty)\rangle = U(+\infty; -\infty)|\psi(-\infty)\rangle \quad (\text{I-73})$$

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

$$U = U(+\infty; -\infty) = \lim_{t \rightarrow +\infty, t_0 \rightarrow -\infty} U(t, t_0) \quad (\text{I-74})$$

Cet opérateur porte le nom de matrice de diffusion.

b-4-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 (I-70) [10],

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = HU(t, t_0) \quad (\text{I-75})$$

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)

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = [A_H(t), H(t)] + i\hbar \left(\frac{d}{dt} A_S(t) \right)_H \quad (\text{I-76})$$

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.

Chapitre II

La théorie des invariants

1- Introduction :

La théorie des invariants pour des Hamiltoniens Hermitiens a été introduite par Lewis et Riesenfeld (1969) [4], où ils ont dérivé une simple relation entre les vecteurs propres de l'invariant et la solution de l'équation de Schrödinger.

La théorie des invariants représente l'un des piliers fondamentaux dans l'étude des systèmes dépendants du temps. Cette importance de la théorie des invariants relie au langage mathématique puissant qui l'a caractérisé, et sur sa souplesse dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Dans cette partie de notre travail, on donne quelques notions essentielles concernant la théorie des invariants. À travers ces notions on peut approcher aux lecteurs au moins une idée sur le rôle de la théorie des invariants dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. On considère la théorie des invariants pour un système quantique général dont l'opérateur Hamiltonien $H(t)$ est explicitement dépendant du temps.

2.1- Les invariants :

On considère l'équation de Schrödinger suivante :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{II-1})$$

Où H est l'hamiltonien du système, c'est un opérateur auto-adjoint explicitement dépendant du temps. 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 :

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I, H] = 0 \quad (\text{II-2})$$

$$I(t) = I^+(t) \quad (\text{II-3})$$

En appliquant l'équation (II-2) sur $|\psi(t)\rangle$ et en utilisant l'équation (II-1) nous obtenons :

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} [I, H(t)] |\psi(t)\rangle = 0 \quad (\text{II-4})$$

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\psi(t)\rangle + IH(t) |\psi(t)\rangle - H(t)I |\psi(t)\rangle = 0 \quad (\text{II-5})$$

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\psi(t)\rangle + Ii\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle - H(t)I |\psi(t)\rangle = 0 \quad (\text{II-6})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (I |\psi(t)\rangle) = H(t) (I |\psi(t)\rangle) \quad (\text{II-7})$$

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.

2.2- Propriétés de l'invariant :

2.2.1- 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 :

$$I(t) | \varphi_{\lambda k} \rangle = \lambda | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-8})$$

Avec le produit hermitien sur l'espace des états :

$$\langle \varphi_{\lambda k} | \varphi_{\lambda' k'} \rangle = \delta_{\lambda \lambda'} \delta_{k k'} \quad (\text{II-9})$$

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

En dérivant l'équation (II-8) par rapport au temps, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} (I(t) | \varphi_{\lambda k} \rangle) = \frac{\partial}{\partial t} (\lambda | \varphi_{\lambda k} \rangle) \quad (\text{II-10})$$

$$\frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + I \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + \lambda \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-11})$$

On applique l'équation (II-2) sur les états propres : $| \varphi_{\lambda k} \rangle$

$$\frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + \frac{1}{i\hbar} [I, H(t)] | \varphi_{\lambda k} \rangle = 0 \quad (\text{II-12})$$

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + IH | \varphi_{\lambda k} \rangle - \lambda H | \varphi_{\lambda k} \rangle = 0 \quad (\text{II-13})$$

Le produit scalaire de l'équation (II-13) par $\langle \varphi_{\lambda' k'} |$ donne

$$\langle \varphi_{\lambda' k'} | i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + \langle \varphi_{\lambda' k'} | IH | \varphi_{\lambda k} \rangle - \langle \varphi_{\lambda' k'} | \lambda H | \varphi_{\lambda k} \rangle = 0 \quad (\text{II-14})$$

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + \lambda' \langle \varphi_{\lambda' k'} | H | \varphi_{\lambda k} \rangle - \lambda \langle \varphi_{\lambda' k'} | H | \varphi_{\lambda k} \rangle = 0 \quad (\text{II-15})$$

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda' k'} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + (\lambda' - \lambda) \langle \varphi_{\lambda' k'} | H | \varphi_{\lambda k} \rangle = 0 \quad (\text{II-16})$$

Pour : $\lambda' = \lambda$

$$\langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle = 0 \quad (\text{II-17})$$

En prenant le produit scalaire de l'équation (II-11) avec l'état propre $\langle \varphi_{\lambda k} |$, on obtient :

$$\langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + \langle \varphi_{\lambda k} | I \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle = \langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial \lambda}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + \lambda \langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-18})$$

$$\langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + \lambda \langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle = \langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial \lambda}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle + \lambda \langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-19})$$

$$\langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle = \langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial \lambda}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-20})$$

$$\langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} \langle \varphi_{\lambda k} | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-21})$$

On a :

$$\langle \varphi_{\lambda k} | \varphi_{\lambda k} \rangle = \delta_{\lambda\lambda} \delta_{kk} = 1 \quad (\text{II-22})$$

Alors :

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \left\langle \varphi_{\lambda k} \left| \frac{\partial I}{\partial t} \right| \varphi_{\lambda k} \right\rangle \quad (\text{II-23})$$

Ce qui implique :

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \left\langle \varphi_{\lambda k} \left| \frac{\partial I}{\partial t} \right| \varphi_{\lambda k} \right\rangle = 0 \quad (\text{II-24})$$

2.1.2- 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 $|\varphi_{\lambda k}\rangle$.

En commençant par l'équation (II-8) et en utilisant l'équation (II-24), on obtient :

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

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

$$(\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II-27})$$

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

$$\langle \varphi_{\lambda \hat{k}} | (\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = \langle \varphi_{\lambda \hat{k}} | \frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II-28})$$

$$(\lambda - \hat{\lambda}) \langle \varphi_{\lambda \hat{k}} | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = \langle \varphi_{\lambda k} | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II-29})$$

On déduit que :

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda \hat{k}} | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + (\lambda - \hat{\lambda}) \langle \varphi_{\lambda \hat{k}} | H | \varphi_{\lambda k} \rangle = 0 \quad (\text{II-30})$$

Donc :

$$i\hbar (\lambda - \hat{\lambda}) \langle \varphi_{\lambda \hat{k}} | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = (\lambda - \hat{\lambda}) \langle \varphi_{\lambda \hat{k}} | H | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-31})$$

Pour $\lambda \neq \hat{\lambda}$ on déduit :

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda \hat{k}} | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = \langle \varphi_{\lambda \hat{k}} | H | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-32})$$

Si (II-32) est valable pour $\lambda = \hat{\lambda}$ aussi bien que pour $\lambda \neq \hat{\lambda}$, 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 :

$$|\varphi_{\lambda k}\rangle_{\alpha} = e^{i\alpha(t)_{\lambda k}} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II-33})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle_{\alpha} = H |\varphi_{\lambda k}\rangle_{\alpha} \quad (\text{II-34})$$

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 :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{i\alpha(t)_{\lambda k}} |\varphi_{\lambda k}\rangle) = H e^{i\alpha(t)_{\lambda k}} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II-35})$$

$$i\hbar \frac{\partial e^{i\alpha(t)_{\lambda k}}}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle e^{i\alpha(t)_{\lambda k}} = H e^{i\alpha(t)_{\lambda k}} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II-36})$$

$$-\hbar \frac{\partial \alpha(t)_{\lambda k}}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda k}\rangle = H |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II-37})$$

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

$$-\hbar \frac{\partial \alpha_{\lambda k}}{\partial t} \langle \varphi_{\lambda' k} | \varphi_{\lambda k} \rangle + \langle \varphi_{\lambda' k} | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda k} \rangle = \langle \varphi_{\lambda' k} | H | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-38})$$

$$\hbar \frac{\partial \alpha_{\lambda k}}{\partial t} \langle \varphi_{\lambda' k} | \varphi_{\lambda k} \rangle = \langle \varphi_{\lambda' k} | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-39})$$

$$\hbar \frac{\partial \alpha_{\lambda k}}{\partial t} \delta_{\lambda \lambda'} \delta_{kk} = \langle \varphi_{\lambda' k} | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-40})$$

$$\hbar \frac{\partial \alpha_{\lambda k}}{\partial t} = \langle \varphi_{\lambda k} | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] | \varphi_{\lambda k} \rangle \quad (\text{II-41})$$

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.

2.2- Solution générale :

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

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\lambda k} c_{\lambda k} e^{i\alpha(t)_{\lambda k}} |\varphi_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II-42})$$

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

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{\lambda k} c_{\lambda k} e^{i\alpha(0)_{\lambda k}} |\varphi(0)_{\lambda k}\rangle \quad (\text{II-43})$$

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

Chapitre III

Solution de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse dépendant du temps

Solution de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse dépendant du temps :

Introduction :

Le potentiel de Morse, nommé d'après le physicien Philip Morse qui est introduit une forme analytique très important d'énergie potentiel pour une molécule diatomique [12]. La forme générale de ce potentiel est défini par : $V(x) = V_1 e^{-2ax} + V_2 e^{-ax}$.

Dans ce chapitre, nous essayerons d'obtenir la solution de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle pour le potentiel de Morse dépendant du temps.

L'Hamiltonien d'un tel système est donnée par la formule suivante :

$$H(x, p, t) = Z(t)P^2 + V_1(t)e^{-2\alpha(t)x} + V_2(t)e^{-\alpha(t)x} \quad (\text{III-1})$$

Où Z, V_1, V_2 sont des paramètres dépendants du temps et a est une constante.

On choisit :

$$AV_1 - CZ = 0 \quad (\text{III-2})$$

$$AV_2 - DZ = 0 \quad (\text{III-3})$$

L'équation de Schrödinger dépendante du temps est :

$$H\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (\text{III-4})$$

Avec

$$H = Z(t) \left[P^2 + \frac{V_1}{Z} e^{-2\alpha x} + \frac{V_2}{Z} e^{-\alpha x} \right] \quad (\text{III-5})$$

D'ou

$$Z(t) \left[-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + \frac{V_1}{Z} e^{-2\alpha x} + \frac{V_2}{Z} e^{-\alpha x} \right] \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (\text{III-6})$$

On a :

$$\frac{V_1}{Z} = \frac{C_0}{A_0} \quad (\text{III-7})$$

Et:

$$\frac{V_2}{Z} = \frac{D_0}{A_0} \quad (\text{III-8})$$

Alors :

$$H = Z(t) \left[P^2 + \frac{C_0}{A_0} e^{-2\alpha x} + \frac{D_0}{A_0} e^{-\alpha x} \right] \quad (\text{III-9})$$

Donc:

$$H = Z(t) H_0 \quad (\text{III-10})$$

Avec :

$$H_0 = P^2 + \frac{C_0}{A_0} e^{-2\alpha x} + \frac{D_0}{A_0} e^{-\alpha x} \quad (\text{III-11})$$

Dans ce cas on n'est pas besoin d'utiliser la méthode des invariants, il suffit d'utiliser la méthode de séparation de variables seulement. On a:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t) \quad (\text{III-12})$$

On pose:

$$\psi(x, t) = T(t) \Phi(x) \quad (\text{III-13})$$

$$i\hbar \Phi(x) \frac{\partial}{\partial t} T(t) = Z(t) H_0 T(t) \Phi(x) \quad (\text{III-14})$$

$$i\hbar \frac{1}{Z(t)T(t)} \frac{\partial}{\partial t} T(t) = \frac{1}{\Phi_n(x)} H_0 \Phi_n(x) \quad (\text{III-15})$$

$$= \text{constant} (\varepsilon_n) \quad (\text{III-16})$$

On obtient les deux équations suivantes:

$$H_0 \Phi_n(x) = \varepsilon_n \Phi_n(x) \quad (\text{III-17})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T(t) = \frac{\varepsilon_n}{i\hbar} Z(t) T(t) \quad (\text{III-18})$$

La solution de l'équation (III-18) est :

$$T(t) = A_n e^{\int_0^t \frac{\varepsilon_n}{i\hbar} Z(t') dt'} \quad (\text{III-19})$$

Donc, il reste à chercher la solution de l'équation suivante :

$$H_0 \Phi_n(x) = \varepsilon_n \Phi_n(x) \quad (\text{III-20})$$

Donc :

$$[-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + \frac{C_0}{A_0} e^{-2\alpha x} + \frac{D_0}{A_0} e^{-\alpha x}] \Phi_n(x) = \varepsilon_n \Phi_n(x) \quad (\text{III-21})$$

On fait le changement de variable suivant : $s = e^{-\alpha x}$;

$$\frac{d}{dx} = \frac{ds}{dx} \frac{d}{ds} = -\alpha s \frac{d}{ds} \quad (\text{III-22})$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \alpha^2 s \frac{d}{ds} \left(s \frac{d}{ds} \right) = \alpha^2 s^2 \frac{d^2}{ds^2} + \alpha^2 s \frac{d}{ds} \quad (\text{III-23})$$

On obtient :

$$[-\hbar^2 \left(\alpha^2 s^2 \frac{d^2}{ds^2} + \alpha^2 s \frac{d}{ds} \right) + \frac{C_0}{A_0} s^2 + \frac{D_0}{A_0} s - \varepsilon_n] \Phi(s) = 0 \quad (\text{III-24})$$

D'où

$$\frac{d^2\Phi}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{d\Phi}{ds} + \frac{1}{s^2} [-\xi_1 S^2 + \xi_2 s - \xi_3] \Phi = 0 \quad (\text{III-25})$$

Avec:

$$\xi_1 = \frac{C_0}{a^2 \hbar^2 A_0}, \xi_2 = -\frac{D_0}{a^2 \hbar^2 A_0}, \xi_3 = -\frac{\varepsilon_n}{a^2 \hbar^2}$$

Pour résoudre cette équation on utilise la méthode de Nikiforov-Ouvarov (N-O) [13].

1-La méthode (N-O) :

La méthode (N-O) 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 [13] :

$$\psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} \psi(s) = 0 \quad (\text{III-26})$$

Où $\sigma(s)$ and $\tilde{\sigma}(s)$ 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 :

$$\psi(s) = \emptyset(s)y(s) \quad (\text{III-27})$$

L'eq(III-26) devienne :

$$\sigma(s)y''(s) + \tau(s)y'(s) + \nu y(s) = 0 \quad (\text{III-28})$$

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

$$\frac{\emptyset(s)'}{\emptyset(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \quad (\text{III-29})$$

L'autre partie $y(s)$ est le type de la fonction hypergéométrique dont les solutions polynomiales sont données par la formule de Rodrigues [14] :

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s)\rho(s)] \quad (\text{III-30})$$

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

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho \quad (\text{III-31})$$

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

$$\pi(s) = \frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma} - k\sigma} \quad (\text{III-32})$$

$$\nu = k + \pi' \quad (\text{III-33})$$

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 :

$$\nu = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma'' \quad (\text{III-34})$$

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) \quad (\text{III-35})$$

Et son dérivé est négatif.

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

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1 - \alpha_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{s^2(1 - \alpha_3 s)^2} \right] \psi = 0 \quad (\text{III-36})$$

Nous pouvons résoudre ceci comme suit. Lorsque l'éq(III-36) est comparée avec l'éq(III-26), nous obtenons

$$\tilde{\tau} = \alpha_1 - \alpha_2 s \quad (\text{III-37})$$

$$\sigma = s(1 - \alpha_3 s) \quad (\text{III-38})$$

Et aussi

$$\tilde{\sigma} = -\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3 \quad (\text{III-39})$$

En substituent ceux-ci dans l'éq(III-32)

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5 s \pm \sqrt{(\alpha_6 - k\alpha_3)s^2 + (\alpha_7 + k)s + \alpha_8} \quad (\text{III-40})$$

Où

$$\alpha_4 = \frac{1}{2}(1 - \alpha_1), \quad (\text{III-41})$$

$$\alpha_5 = \frac{1}{2}(\alpha_2 - 2\alpha_3), \quad (\text{III-42})$$

$$\alpha_6 = \alpha_5^2 + \xi_1, \quad (\text{III-43})$$

$$\alpha_7 = 2\alpha_4\alpha_5 - \xi_2, \quad (\text{III-44})$$

$$\alpha_8 = \alpha_4^2 + \xi_3, \quad (\text{III-45})$$

Dans l'éq(III-40), la fonction sous la racine carrée doit être le carré d'un polynôme conformément à la méthode de (N-O), de telle sorte que

$$k_{1,2} = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) \mp 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \quad (\text{III-46})$$

Où, nous définissons

$$\alpha_9 = \alpha_3\alpha_7 + \alpha_3^2\alpha_8 + \alpha_6 \quad (\text{III-47})$$

Pour chaque K les fonctions π sont obtenues. Pour

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) - 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \quad (\text{III-48})$$

π devienne

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5 s - \left[\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) s - \sqrt{\alpha_8} \right] \quad (\text{III-49})$$

Pour le même K , pour Eqs(III-36), (III-37) et (III-40)

$$\tau = \alpha_1 + 2\alpha_4 - (\alpha_2 - 2\alpha_5)s - 2\left[(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8})s - \sqrt{\alpha_8}\right] \quad (\text{III-50})$$

Et

$$\tau' = -(\alpha_2 - 2\alpha_5) - 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) = -2\alpha_3 - 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) < 0 \quad (\text{III-51})$$

Sont obtenues. Quant l'éq. (III-33) est utilisée avec l'éq (III-51) et l'éq (III-52) l'équation suivante est dérivée :

$$\alpha_2 n - (2n + 1)\alpha_5 + (2n + 1)(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) + n(n - 1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} = 0 \quad (\text{III-52})$$

Cette équation donne le spectre de l'énergie pour le problème donné. Pour l'éq. (III-30)

$$\rho(s) = s^{\alpha_{10}-1} (1 - \alpha_3 s)^{\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1} \quad (\text{III-53})$$

Est trouvé et lorsque cette équation est utilisée dans l'éq. (III-30)

$$y_n = P_n^{(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1)} (1 - 2\alpha_3 s) \quad (\text{III-54})$$

Est obtenue, où,

$$\alpha_{10} = \alpha_1 + 2\alpha_4 + 2\sqrt{\alpha_8} \quad (\text{III-55})$$

$$\alpha_{11} = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) \quad (\text{III-56})$$

Et $P_n^{(\alpha, \beta)}$ sont les polynômes de Jacobi. Utilisant l'éq(III-29)

$$\phi(s) = s^{\alpha_{12}} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} \quad (\text{III-57})$$

Est obtenue et la solution générale devienne

$$\psi = \phi(s)y(s) \quad (\text{III-58})$$

$$\psi = s^{\alpha_{12}}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} P_n^{(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1)}(1 - 2\alpha_3 s) \quad (\text{III-59})$$

Ici, les fonctions alpha sont données par :

$$\alpha_{12} = \alpha_4 + \sqrt{\alpha_8} \quad (\text{III-60})$$

$$\alpha_{13} = \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \quad (\text{III-61})$$

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

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} P_n^{(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1)}(1 - 2\alpha_3 s) = L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11} s) \quad (\text{III-62})$$

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} = e^{\alpha_{13} s} \quad (\text{III-63})$$

La solution donnée dans l'éq(III-60) devienne

$$\psi = s^{\alpha_{12}} e^{\alpha_{13} s} L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11} s) \quad (\text{III-64})$$

Dans certains cas, on est besoin d'une deuxième solution de l'éq(III-36). Dans ce cas, si la même procédure est suivie on utilisant

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8) + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} \quad (\text{III-65})$$

Cette solution devienne

$$\psi = s^{\alpha_{12}^*} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12}^* - \frac{\alpha_{13}^*}{\alpha_3}} P_n^{(\alpha_{10}^*-1, \frac{\alpha_{11}^*}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1)}(1 - 2\alpha_3 s) \quad (\text{III-66})$$

Est le spectre d'énergie est

$$\alpha_2 n - 2n\alpha_5 + (2n + 1)(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) + n(n - 1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} + \alpha_5 = 0 \quad (\text{III-67})$$

Les paramètres prédéfinis alpha sont les suivants :

$$\alpha_{10}^* = \alpha_1 + 2\alpha_4 - 2\sqrt{\alpha_8} \quad (\text{III-68})$$

$$\alpha_{11}^* = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \quad (\text{III-69})$$

$$\alpha_{12}^* = \alpha_4 - \sqrt{\alpha_8} \quad (\text{III-70})$$

$$\alpha_{13}^* = \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \quad (\text{III-71})$$

Si nous comparons l'éq (III-36) avec l'éq(III-25), nous obtenons les paramètres α_i :

$$\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 0, \alpha_3 = 0, \alpha_4 = 0, \alpha_5 = 0, \alpha_6 = \xi_1, \alpha_7 = -\xi_2, \alpha_8 = \xi_3, \alpha_9 = \xi_1, \alpha_{10} = 1 + 2\sqrt{\xi_3}, \alpha_{11} = 2\sqrt{\xi_1}, \alpha_{12} = \sqrt{\xi_3}, \alpha_{13} = -\sqrt{\xi_1} \quad (\text{III-72})$$

2-L'énergie :

$$E_n = -\frac{a^2 \hbar^2}{4} \left[2n + 1 - \frac{\xi_2}{\sqrt{\xi_1}} \right]^2 Z(t) \quad (\text{III-73})$$

La solution de l'équation (III-25) est :

$$\Phi(x) = e^{-a\sqrt{\xi_3}x} e^{-\sqrt{\xi_1}e^{-ax}} L_n^{2\sqrt{\xi_3}}(2\sqrt{\xi_1}e^{-ax}) \quad (\text{III-74})$$

3-La fonction d'onde :

$$\psi(x, t) = A_n e^{\int_0^t \frac{\varepsilon_n}{i\hbar} Z(t') dt'} e^{-a\sqrt{\xi_3}x} e^{-\sqrt{\xi_1}e^{-ax}} L_n^{2\sqrt{\xi_3}}(2\sqrt{\xi_1}e^{-ax}) \quad (\text{III-75})$$

Où $L_n^\alpha(x)$: est le polynôme de Laguerre et A_n est la constante de normalisation. A_n est

déterminé par la condition : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$. On trouve :

$$A_n = \sqrt{-\frac{a(2\sqrt{\xi_1})^\alpha}{J(\alpha, n)}}, \quad (\text{III-76})$$

Où : $J(\alpha, n) = \int_0^{+\infty} z^{\alpha-1} e^{-z} (L_n^\alpha(z))^2 dz$ et $\alpha = 2\sqrt{\xi_3}$.

Conclusion

Conclusion :

Dans cette mémoire on a exposé la construction de l'équation de Schrödinger, on a effectué sa solution pour un hamiltonien indépendant du temps, et on a trouvé la solution d'une équation de Schrödinger stationnaire par la méthode de séparation des variables spatial et temporelle dans le cas unidimensionnel. Par contre si l'hamiltonien du système est une fonction de temps, dans ce cas on est obligé de résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps qui est un outil mathématique puissant pour décrire l'évolution dans le temps pour les systèmes physiques quantiques. Pour résoudre ce problème on a appliqué une méthode très efficace, qui donne la solution analytique exacte de l'équation de Schrödinger dépendant du temps, c'est la méthode des invariants.

Dans ce travail, nous avons obtenus la solution exacte de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle pour le potentiel de Morse dépendant du temps. Nous avons appliqué la méthode de N-O pour réduire l'équation différentielle du second ordre à l'équation de type hyper géométrique. Nous avons obtenus le spectre d'énergie et ainsi les fonctions d'onde en termes de polynômes de Laguerre.

Bibliographie

Bibliographie :

- [1] E.Schrödinger , Naturwissenschaften 14 (1926) 664
- [2] C. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique quantique T1 (Hermann, Paris, 1977)
- [3] A. Messiah, Mécanique quantique T2, (Dunod, Paris, 1995) nouvelle édition
- [4] Lewis HR Jr and Riesenfeld WB 1969 J. Math.Phys. 10 1458
- [5] L. Krache, Thèse de Doctorat, (Université de Sétif, 2010).
- [6] Gérald Goldstein, Université Libre de Bruxelles Faculté des Sciences Appliqués
Année académique 2002-2003.
- [7] D.Blokhintsev, Principe de mécanique quantique, Traduit du russe en français (1981) par
S.Medvedev, Édition Mir-Moscou
- [8] Travaux dirigés de physique quantique PA-101-PC02 Puits quantique carre – Correction .
- [9] - Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics , Vol 1,2 .
- [10] S. Menouar, Thèse de Doctorat ès Sciences, (Université de Sétif, 2010)
- [11] C.J. Efthimiou and D. Spector, Phys.Rev. A 49 (1994) 2301
- [12] P. M. Morse, Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational
levels. *Phys. Rev.* 1929, 34, 57-64
- [13] A.F.Nikiforov, and V.B.Ovarov, special Functions of Mathematical Physics
- [14] Sameer M., Ikhdair and Ramazan Sever, 06531 Ankara, Turkey (April 9, 2007)

الملخص :

في هذا العمل قمنا بحل معادلة شرودنجر لكمون مورس المتعلق بالزمن للحالة الخاصة ($a=c^{te}$). قمنا بتطبيق نظرية فصل المتغيرات لحل معادلة شرودنجر المتعلقة بالزمن و هي أداة قوية لوصف تطور الجمل الفيزيائية الكوانتية خلال الزمن. تحصلنا على معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية من نوع فوق الهندسي ، لحلها استعملنا طريقة (N-O). تحصلنا على طيف الطاقة وكذا دوال الموجة ككثيرات حدود للاقار.

الكلمات المفتاحية : كمون مورس متعلق بالزمن، معادلة شرودنجر، طريقة فصل المتغيرات.

Abstract :

In this work we have solved the Schrödinger equation for the time-dependent Morse potential for particular case ($a=c^{te}$). We have used the variables separation method to solve the time-dependent Schrödinger equation which is a powerful mathematical tool to describe the evolution over time of quantum physical systems. We have obtained a second differential equation of hyper geometric type, to solve it; we use the (N-O) method. We have obtained the energy spectrum and the wave functions in terms of Laguerre polynomials.

Keywords: time-dependant Morse potential, Schrödinger equation, variables separation method.

Résumé :

Dans ce travail nous avons résolu l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse dépendant du temps pour le cas particulier ($a=c^{te}$). Nous avons utilisés la méthode de séparation des variables pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps qui est un outil mathématique puissant pour décrire l'évolution dans le temps pour les systèmes physiques quantiques. Nous avons obtenus une équation différentielle de second ordre de type hypergéométrique, pour le résoudre nous avons utilisés la méthode (N-O). Nous avons obtenus le spectre d'énergie ainsi les fonctions d'ondes en termes de polynômes de Laguerre.

Mots clés : le potentiel de Morse dépendant du temps, l'équation de Schrödinger, la méthode de séparation des variables.