

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° : PhTh 01/2019



DOMAINE : Sciences de la matière  
FILIERE : Physique  
OPTION : PHYSIQUE THEORIQUE

Mémoire présenté pour l'obtention  
Du diplôme de Master Académique

Par:

TAIEBI ACHWAK

MEDDAH ALDJIA

Intitulé

**Solution de l'équation de Schrödinger  
dans l'espace Non commutatif avec le  
Potentiel de Kratzer**

Soutenu le 03 /07 /2019 devant le jury composé de:

Boussahel Mounir

Debabi Mourad

Bouferrache Karim

Medjedel Soheyb

Université de M'sila

Université de M'sila

Université de M'sila

Université de M'sila

Président

Rapporteur

Examineur 1

Examineur 2

2018/2019

# Remerciements

*Tout d'abord nous remercions Allah, notre créateur nos avoir donné la force, la volonté et le courage afin d'accomplir ce travail modeste.*

*Nous adressons le grand remerciement à notre encadreur Mr M. Debabi pour ses conseils et ses dirigés du début à la fin de ce travail.*

*Nous remercions pour le même occasion, Mr M. Boussahel Mr K. Bouferrache et Mr S. Medjedel, membres de jury pour l'honneur qu'ils nous ont fait en acceptant de juger à notre soutenance.*

*Enfin, je remercie toute personne ayant participé de près ou de loin pour la réalisation de ce travail.*

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction générale</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Géométrie non commutative</b>	<b>6</b>
2.1	Introduction . . . . .	6
2.2	Algèbre d'espace-temps non-commutative . . . . .	7
2.3	La quantification de Weyl-Le produit de Moyal . . . . .	8
2.3.1	La quantification de Weyl : . . . . .	8
2.3.2	Le produit star : . . . . .	8
2.3.3	Les propriétés du produit star (produit de Moyal) . . . . .	11
2.4	L'équation de Schrödinger sur un espace-non commutatif . . . . .	13
2.5	Le décalage "Bopp shift" . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Solution de l'équation de Schrödinger avec plusieurs types des potentiels</b>	<b>18</b>
3.1	Résolution de l'équation de Schrödinger d'atome hydrogène dans le cas commutative : . . . . .	18
3.1.1	Expression en coordonnées cartésiennes passage aux coordonnées sphériques . . . . .	18
3.1.2	Atome d'hydrogène sur un espace non comutatif : . . . . .	24
3.1.3	Hamiltonien non commutatif : . . . . .	24
3.2	Atome Hydrogénoide dans L'espace non commutatif . . . . .	26

<b>4</b>	<b>Solution du l'équation de Schrödinger avec le Potenteil de Kratzer</b>	<b>29</b>
4.1	Introduction . . . . .	29
4.2	La solution d'équation de Schrödinger du potentiel de kratzer dans l'espace non commutative . . . . .	33
4.2.1	Etude la partie angulaire . . . . .	35
4.2.2	Etude la partie radial . . . . .	36
4.2.3	Correction des énergies d du potentiel de kratzer dans la géométrie no commutative . . . . .	37
	<b>Conclusion</b>	<b>46</b>

# *Chapitre 1*

## *Introduction générale*

# Chapitre 1

## Introduction générale

Le vingtième siècle a apporté avec lui son lot de découvertes faites par l'homme. En physique par exemple deux grandes théories ont révolutionné le monde. La relativité (générale) et la mécanique quantique.

La relativité générale est la théorie qui décrit l'infiniment grand (les planètes, les galaxies, . . . . .). Ses fondements ont été établies par Albert Einstein en 1916. Elle utilise principalement la géométrie Riemannienne comme formalisme mathématique.

La mécanique quantique est la théorie qui décrit les systèmes microscopiques, les constituants les plus infimes de la matière (les atomes, les électrons, les quarks, . . . . .). Elle fut établie par un ensemble de physiciens tels que N. Bohr, W. Heisenberg, E. Schrödinger et Paul A. M. Dirac, etc. . . .

Une première théorie quantique véritable de la mécanique quantique est présentée en 1925 par Heisenberg [1] : la mécanique des matrices. L'année suivante, Schrödinger propose une seconde théorie, la mécanique ondulatoire. En 1927, Dirac revient à formalisme mathématique des vecteurs d'états. Il démontre que son formalisme des vecteurs d'états est non seulement équivalent au formalisme des matrices de Heisenberg et à celui des fonctions d'onde de Schrödinger. En 1928, Dirac réussit à unifier sa mécanique des vecteurs d'états avec la relativité restreinte. Dirac prédit en 1930, à partir de sa mécanique quantique relativiste, l'existence de l'antimatière.

Les antiparticules seraient des particules ordinaires d'énergie négative et l'anti-électron est proton (charge opposé). En 1931, Dirac modifie sa prédiction : les antiparticules seraient des particules totalement nouvelles Les antiélectrons n'est pas protons (sont des positrons). La prédiction corrigée de Dirac sera confirmée expérimentalement par Carl Anderson en 1932 - 1933. En 1948, apparition une nouvelle théorie (théorie quantique des champs) cette théorie continue de se développer depuis 1948 et discute aujourd'hui des quatre forces fondamentales qui régissent tous les phénomènes physiques connus.

Historiquement , le passage de la mécanique quantique relativiste s'est effectué à partir d'une généralisation de l'équation de Schrödinger à un système relativiste. l'étude d'un système microscopique est passée sur la résolution de cette équation.

L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la mécanique quantique non relativiste. Elle joue en mécanique quantique le même rôle que l'équation de Newton, de Lagrange ou de Hamilton en mécanique classique ou les équations de Maxwell en électromagnétisme. Elle décrit l'évolution temporelle de l'état d'un objet quantique en cherchant ce qu'on appelle la fonction d'onde ainsi le spectre d'énergie des différents états possible. Nous allons étudier cette équation dans ce travail par la méthode de séparation des variables.

Le père de la mécanique quantique est le physicien Max Planck qui introduire la célèbre constante  $\hbar = h/2\pi$  cette constante est le fondement de la réalité physique, puisqu'on la retrouve dans la formulation du principe d'incertitude de Heisenberg qui rend impossible la mesure simultanée de la position et de l'impulsion d'une particule, car l'incertitude  $\Delta x$  sur la mesure de sa position et l'incertitude  $\Delta p$  sur son impulsion doivent satisfaire à la relation de Heisenberg.  $\Delta x \cdot \Delta p \simeq h/2$ . C'est ainsi que la position  $x$  et l'impulsion  $p$  deviennent des opérateurs  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  agissant sur l'espace des états qui est un espace de Hilbert leur commutateur est donné par :

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

La mécanique quantique en espace non-commutatif correspond à l'étude de Hamiltonien dépendant des opérateurs de position et l'impulsion qui satisfont une algèbre de commutateurs non canonique. L'étude de modèles exactement solubles en mécanique quantique peut nous permettre d'avoir une meilleure compréhension de certains phénomènes survenant en théorie quantique des champs non-commutative.

### **Le but principale de ce travail**

L'objectif de ce travail est donner une solution de l'équation de Schrödinger dans l'espace non commutative pour le potentiel de Kratzer.

Dans notre mémoire de master ,il nous a semblé utile d'exposer d'abord, au 1<sup>er</sup> chapitre en va présenter l'introduction générale , le 2<sup>ème</sup> chapitre, qui comporte des rappels sur la géométrie non commutative et en va présenter l'équation de Schrödinger dans l'espace non commutative et produit star et décalage de Bopp Shift, dans le 3<sup>ème</sup> chapitre on va étudier la solution du l'équation de Schrödinger de le potentiel coulomb dans la cas commutative et non commutative, aussi étudier la solution du l'équation de Schrödinger de hydrogénoide dans L'espace non commutative, au dernier chapitre on résoudre l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Kratzer.

*Chapitre 2*  
*Géométrie non commutative*

# Chapitre 2

## Géométrie non commutative

### 2.1 Introduction

La géométrie non commutative est une généralisation de la géométrie inspirée par la physique quantique dont le but est de pouvoir étudier des espaces aussi bizarres. L'idée est simple : un espace traditionnel peut être représenté par une structure algébrique commutative ( $ab = ba$ ). On est capable de coder tous les outils géométriques dans cette structure algébrique. Serait-il possible de généraliser ces outils à des structures algébriques non commutative ( $ab \neq ba$ ) qui seraient alors une description algébrique des espaces impossibles à définir de façon traditionnelle ? On aurait alors une généralisation de la notion même d'espace géométrique.

La première apparition de notion de l'espace-temps non-commutatif en physique des particules remonte aux travaux de Snyder en 1947 [2]. Le but était de pouvoir se débarrasser des divergences ultraviolettes de théorie quantique des champs tout en conservant la covariance de Lorentz. Mais, comme parallèlement à cela, la théorie de la renormalisation produisait des résultats remarquables.

La géométrie non-commutative [3, 4, 5] est une géométrie où les coordonnées de l'espace-temps ne commutent pas, elle a été conçue à la fois répondre à des besoins en mathématiques et pour permettre d'abord de certains problèmes de physique théorique,

dont la forme générale des commutateurs [6, 7] :

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

## 2.2 Algèbre d'espace-temps non-commutative

L'algèbre non commutative dans la forme générale par relation suivantes [8, 9, 10] :

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = i\theta_{ij}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = i\sigma_{ij} \quad (2.2)$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

les quantités  $\theta_{ij}, \sigma_{ij}$  sont des paramètres antisymétrique réelles pouvant dépendre des opérateurs  $\hat{p}$  et  $\hat{x}$  satisfaisant à :

$$\implies \theta_{ij} = \varepsilon_{ij}\theta$$

$$\implies \sigma_{ij} = \varepsilon_{ij}\sigma$$

$$\text{avec : } \varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji} = 1$$

Lorsque on pose  $\theta \rightarrow 0$  nous trouvons les relations de la mécanique quantique ordinaire (commutative).

La non commutativité n'est réalisée que sur les opérateurs position par le biais des paramètres (non commutativité positionnelle) [8]. L'algèbre au -dessus se réécrit donc :

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = i\theta_{ij}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (2.3)$$

$$[\widehat{x}_i, \widehat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

où  $\theta_{ij}$  est un tenseur anti-symétrique dont les éléments sont réels.

$$\theta_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -\theta & 0 & 0 \\ \theta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

et ceci donne l'algèbre d'Heisenberg.

$$\Delta x_i \cdot \Delta p_j \simeq \frac{\theta_{ij}}{2} \quad (2.5)$$

## 2.3 La quantification de Weyl-Le produit de Moyal

### 2.3.1 La quantification de Weyl :

La quantification de Weyl est une technique utilisée pour décrire la mécanique quantique à partir de l'espace de phase de la mécanique classique. C'est une prescription qui nous permet d'associer un opérateur quantique à une fonction classique qui dépend des variables de l'espace de phase (variables canoniques).

### 2.3.2 Le produit star :

Le formalisme du produit-star initié par Weyl et Wigner pour permettre une description de la mécanique quantique en termes d'espace des phases, s'articule non pas autour d'opérateurs non commutants, comme dans l'approche opératorielle, mais autour de la déformation du produit entre les variables de l'espace des phases, nous allons voir comment ce formalisme peut être utilisé dans le cadre de MQNC.

$\tilde{f}(k)$  transformation de Fourier [10, 11, 12] :

$$f(x) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{-ik_i x^i} \tilde{f}(k) \iff \tilde{f}(k) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{ik_i x^i} f(x)$$

$$g(x) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{-ik_i x^i} \tilde{g}(k) \iff \tilde{g}(k) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{ik_i x^i} g(x) \quad (2.6)$$

On définit le symbole de Weyl par :

$$w(f) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{ik_i x^i} \tilde{f}(k)$$

$$w(g) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{ik_i x^i} \tilde{g}(k) \quad (2.7)$$

Si  $g(x)$  et  $f(x)$  est fonction réelle alors l'opérateur de Weyl est hermitien.

Le produit de deux opérateurs de Weyl de deux fonctions soit égal à l'opérateur de Weyl associé au produit star de deux fonctions :

$$w(f)w(g) = w(f * g) \quad (2.8)$$

On commence par le premier terme

$$w(f)w(g) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D k e^{ik_i x^i} \tilde{f}(k) (2\pi)^{-D/2} \int d^D k' e^{ik'_i x^i} \tilde{g}(k')$$

$$= (2\pi)^{-D/2} (2\pi)^{-D/2} \iint d^D k d^D k' \tilde{f}(k) \tilde{g}(k') e^{ik_i x^i} e^{ik'_i x^i} \quad (2.9)$$

En utilisant la formule de Baker-Campbell-Hausdorff [8, 13, 14, 15]:

$$e^A e^B = e^{A+B + \frac{1}{2}h[A,B] + \frac{1}{12}[[A,B],B] - \frac{1}{12}[[A,B],A] + \dots} \quad (2.10)$$

Valable pour les opérateur A et B tel que :

$$[[A, B], B] = [[A, B], A] = 0 \quad (2.11)$$

En suite le produit  $w(f) w(g)$  prend la forme :

$$w(f)w(g) = (2\pi)^{-D/2}(2\pi)^{-D/2} \iint d^D k d^D k' \tilde{f}(k) \tilde{g}(k') e^{i(k_i+k'_i)x^i} e^{-\frac{i}{2}\theta^{ij} k_i k'_j} \quad (2.12)$$

après on pose  $k + k' = q$  et on trouve :

$$w(f)w(g) = (2\pi)^{-D/2}(2\pi)^{-D/2} \iint d^D k d^D q \tilde{f}(k) \tilde{g}(q - k) e^{iq_i x^i} e^{-\frac{i}{2}\theta^{ij} (k_i q_j - k_i k_j)} \quad (2.13)$$

On a  $\theta^{ij}$  est antisymétrique ( $\theta^{ij} = -\theta^{ji}$ ) et  $k_i k_j$  est symétrique ( $k_i k_j = k_j k_i$ ).

$$w(f)w(g) = (2\pi)^{-D/2}(2\pi)^{-D/2} \iint d^D k d^D q \tilde{f}(k) \tilde{g}(q - k) e^{iq_i x^i} e^{-\frac{i}{2}\theta^{ij} k_i q_j} \quad (2.14)$$

On passe au deuxième terme

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

En comparant entre (2.14) et (2.15)

$$\widetilde{(f * g)}(q) = \int d^D k \tilde{f}(k) \tilde{g}(q - k) e^{-\frac{i}{2}\theta^{ij} k_i q_j} \quad (2.16)$$

où  $\widetilde{(f * g)}(x)$  est la transformée de fourier de  $(f * g)(x)$

$$(f * g)(x) = (2\pi)^{-D/2} \int d^D q e^{iq_i x^i} \widetilde{(f * g)}(q) \quad (2.17)$$

$$= (2\pi)^{-D/2}(2\pi)^{-D/2} \iint d^D k d^D q \tilde{f}(k) \tilde{g}(q-k) e^{iq_i x^i} e^{-\frac{i}{2} \theta^{ij} k_i q_j}$$

D'après [8] :

$$f(x) \exp\left(\frac{i}{2} \overleftarrow{\partial}_i \theta^{ij} \overrightarrow{\partial}_j\right) g(x) = f(x)g(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{i}{2}\right)^n \frac{1}{n!} \theta^{i_1 j_1} \dots \theta^{i_n j_n} \partial_{i_1} \dots \partial_{i_n} f(x) \partial_{j_1} \dots \partial_{j_n} g(x) \quad (2.18)$$

On peut écrire le produit star de deux fonctions au premier ordre de  $\theta$ , comme suit :

$$f * g = f(x) \exp\left(\frac{i}{2} \overleftarrow{\partial}_i \theta^{ij} \overrightarrow{\partial}_j\right) g(y) \Big|_{x=y} \quad (2.19)$$

$$f * g = f(x)g(x) + \frac{i}{2} \theta^{ij} \partial_i f(x) \partial_j g(y) + O(\theta^2) \Big|_{x=y} \quad (2.20)$$

Si  $\theta = 0$  le produit star de deux fonctions égal au produit ordinaire de ces fonctions donc on trouve le cas commutative.

$$f(x) * g(x) = f(x)g(x) \quad (2.21)$$

### 2.3.3 Les propriétés du produit star (produit de Moyal)

Dans ce qui va suivre, on va illustrer quelques autres propriétés fondamentales du produit star [9, 16]:

**1-Le produit star est non-commutatif :**

$$f(x) * g(x) \neq g(x) * f(x) \quad (2.22)$$

$$\text{Par contre : } g(x) * f(x) = f(x) * g(x) \Big|_{\theta=-\theta}$$

## 2-Le produit star est associatif

$$(f(x) * g(x)) * h(x) = f(x) * (g(x) * h(x)) = f * g * h \quad (2.23)$$

## 3-La conjugation complexe

$$(f(x) * g(x))^* = f(x)^* * g(x)^* \quad (2.24)$$

## 4-Produit star sous le signe intégral

$$\int (f * g)(x) d^4x = \int (g * f)(x) d^4x = \int (f)(x)g(x) d^4x$$

En raison de l'antisymétrie de  $\theta$ , l'exposant disparaît ainsi :

$$\int (f * g)(x) d^4x = \int d^4k \tilde{f}(k) \tilde{g}(-k) = \int (f.g)(x) d^4x \quad (2.25)$$

## 5-de la propriété (4) nous pouvons déduire la propriété cyclique

$$\int (f_1 * f_2 * \dots * f_n)(x) d^4x = \int (f_n * f_1 * \dots * f_{n-1})(x) d^4x \quad (2.26)$$

## 6-Règle de Leibniz

Il est facile vérifier que la dérivée de produit star satisfait à la règle de Leibniz

$$\partial_\mu (f * g) = \partial_\mu f * g + f * \partial_\mu g \quad (2.27)$$

## 2.4 L'équation de Schrödinger sur un espace-non commutatif

Il suffit de remplacer les produits de fonction d'onde (ou les champs ) par le produit star où le produit Moyal, Dans l'espace temps non commutatif à  $D$  dimensions.

L'équation de Schrödinger sur un espace-temps non commutatif aura la forme [7, 16, 17] :

$$\hat{H}(\vec{p}, \vec{x}) * \Psi(\vec{x}, t) = E\Psi(\vec{x}, t) \quad (2.28)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{x}, t) = \left[ \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \right] * \Psi(\vec{x}, t) \quad (2.29)$$

Le produit star entre l'opérateur du potentiel et la fonction d'onde est défini comme :

$$V(\vec{x}) \cdot \Psi(\vec{x}, t) \rightarrow V(\vec{x}) * \Psi(\vec{x}, t) \quad (2.30)$$

Mezincescu [17] et [7, 16, 18, 19] a démontré la relation suivante :

$$V(\vec{x}) * \Psi(\vec{x}) = V\left(\vec{x} - \frac{\vec{p}}{2}\right) \Psi(\vec{x}, t) \quad (2.31)$$

Démonstration :

A partir (2.18) :

$$V(\vec{x}) * \Psi(\vec{x}) = V(\vec{x})\Psi(\vec{x}) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{2}\right)^n \partial_{i_1} \dots \partial_{i_n} V(\vec{x}) \theta^{i_1 j_1} \dots \theta^{i_n j_n} \partial_{j_1} \dots \partial_{j_n} \Psi(\vec{x}) \quad (2.32)$$

On a :  $\partial_{j_n} = \frac{\partial}{\partial x^{j_n}}$  et  $ip_{j_n} = \hbar \frac{\partial}{\partial x^{j_n}}$  avec  $\hbar = 1$

On replace  $\partial_{j_k}$  par :

$$V(\vec{\hat{x}}) * \Psi(\vec{\hat{x}}) = V(\vec{\hat{x}})\Psi(\vec{\hat{x}}) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{2}\right)^n \partial_{i_1} \dots \partial_{i_n} V(\vec{\hat{x}}) \theta^{i_1 j_1} \dots \theta^{i_n j_n} (i)^n p_{j_1} \dots p_{j_n} \Psi(\vec{\hat{x}}) \quad (2.33)$$

A partire de [17] :

$$\widehat{p}^{j_n} = \theta^{i_n j_n} p_{j_n} \quad (2.34)$$

$$V(\vec{\hat{x}}) * \Psi(\vec{\hat{x}}) = V(\vec{\hat{x}})\Psi(\vec{\hat{x}}) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-1}{2}\right)^n \partial_{i_1} \dots \partial_{i_n} V(\vec{\hat{x}}) \widehat{p}^{j_1} \dots \widehat{p}^{j_n} \Psi(\vec{\hat{x}}) \quad (2.35)$$

La transformation de Fourier de  $V(\vec{\hat{x}})$  :

$$\partial_{i_1} \dots \partial_{i_n} V(\vec{\hat{x}}) \widehat{p}^{j_1} \dots \widehat{p}^{j_n} \Psi(\vec{\hat{x}}) = (i)^n \int dk \exp(ikx) (k \cdot \widehat{p})^n \widehat{V}(k) \Psi(\vec{\hat{x}}) \quad (2.36)$$

Donc :

$$V(\vec{\hat{x}}) * \Psi(\vec{\hat{x}}) = V(\vec{\hat{x}})\Psi(\vec{\hat{x}}) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-1}{2}\right)^n (i)^n \int dk \exp(ikx) (k \cdot \widehat{p})^n \widehat{V}(k) \Psi(\vec{\hat{x}})$$

$$V(\vec{\hat{x}}) * \Psi(\vec{\hat{x}}) = V(\vec{\hat{x}})\Psi(\vec{\hat{x}}) + \int dk \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{2}\right)^n (k \cdot \widehat{p})^n \exp(ikx) \widehat{V}(k) \Psi(\vec{\hat{x}})$$

$$V(\vec{\hat{x}}) * \Psi(\vec{\hat{x}}) = V(\vec{\hat{x}})\Psi(\vec{\hat{x}}) + \int dk \left( e^{(-\frac{i}{2}k \cdot \widehat{p})} - 1 \right) e^{(ikx)} \widehat{V}(k) \Psi(\vec{\hat{x}})$$

$$V(\vec{\hat{x}}) * \Psi(\vec{\hat{x}}) = V(\vec{\hat{x}})\Psi(\vec{\hat{x}}) + \int dk \left( e^{(-\frac{i}{2}k \cdot \widehat{p} + ikx)} \right) \widehat{V}(k) \Psi(\vec{\hat{x}}) - \int dk e^{(ikx)} \widehat{V}(k) \Psi(\vec{\hat{x}})$$

$$V(\vec{\hat{x}}) * \Psi(\vec{\hat{x}}) = V(\vec{\hat{x}})\Psi(\vec{\hat{x}}) + \int dk \left( e^{i(x-\frac{\tilde{p}}{2})k} \right) \widehat{V}(k)\Psi(\vec{\hat{x}}) - \widehat{V}(k)\Psi(\vec{\hat{x}})$$

$$V(\vec{\hat{x}}) * \Psi(\vec{\hat{x}}) = \int dk \left( e^{ik(x-\frac{\tilde{p}}{2})} \right) \widehat{V}(k)\Psi(\vec{\hat{x}})$$

$$V(\vec{\hat{x}}) * \Psi(\vec{\hat{x}}) = V\left(x - \frac{\tilde{p}}{2}\right) \Psi(\vec{\hat{x}}) \quad (2.37)$$

## 2.5 Le décalage "Bopp shift"

On peut écrire les opérateur d'espace-temps non commutatifs  $\hat{x}_i$  et  $\hat{p}_i$  en termes des opérateurs ordinaires de positions  $x_i$  et d'impulsions  $p_i$  [20] en utilisant la transformation suivante [7, 16, 17, 18, 19] :

$$\hat{x}_i = x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_j \quad (2.38)$$

$$\hat{p}_j = p_j \quad (2.39)$$

La dernière tranformation s'appelle : Le décalage " Bopp shift".

Au cas où la dimension d'espace est  $D = 2$  on peut représenter les relations ci-dessus comme : ( $\theta_{ij} = \varepsilon_{ij}\theta$  et  $\varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji} = 1$ )

$$\hat{x} = x - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_y = x - \frac{\theta}{2\hbar} p_y \quad (2.40)$$

$$\hat{y} = y - \frac{\theta_{ji}}{2\hbar} p_x = y + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_x = y + \frac{\theta}{2\hbar} p_x \quad (2.41)$$

$$\hat{p}_x = p_x \quad (2.42)$$

$$\widehat{p}_y = p_y \quad (2.43)$$

Utilisons les équation (2.38) et (2.39) pour calculé le commutateurs :

$$[x_i, x_j], [x_i, p_j], [p_i, p_j] \quad (2.44)$$

On trouve les lois de commutation entre les coordonnées d'un espace-temps commutatif.

$$\begin{aligned} [x_i, x_j] &= \left[ \widehat{x}_i + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j, \widehat{x}_j + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_i \right] \\ &= [\widehat{x}_i, \widehat{x}_j] + \frac{\theta_{ji}}{2\hbar} [\widehat{x}_i, \widehat{p}_i] + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} [\widehat{p}_i, \widehat{x}_i] + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \frac{\theta_{ji}}{2\hbar} [\widehat{p}_j, \widehat{p}_i] \\ &= i\theta_{ij} + \frac{\theta_{ji}}{2\hbar}(i) + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar}(-i) + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \frac{\theta_{ji}}{2\hbar}(0) \\ &= i\theta_{ij} + \frac{-\theta_{ij}}{2\hbar}(i) + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar}(-i) + 0 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\implies [x_i, x_j] = 0 \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} [x_i, p_j] &= \left[ \widehat{x}_i + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j, \widehat{p}_j \right] \\ &= [\widehat{x}_i, \widehat{p}_j] + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} [\widehat{p}_j, \widehat{p}_j] \\ &= i\hbar\delta_{ij} + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar}(0) \\ &= i\hbar\delta_{ij} \end{aligned} \quad (2.47)$$

$$\implies [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (2.48)$$

$$[p_i, p_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$$

$$\implies [p_i, p_j] = 0 \quad (2.49)$$

*Chapitre 3*

*Solution de l'équation de*  
*Schrödinger avec plusieurs*  
*types des potentiels*

# Chapitre 3

## Solution de l'équation de Schrödinger avec plusieurs types de potentiels

### 3.1 Résolution de l'équation de Schrödinger d'atome hydrogène dans le cas commutative :

#### 3.1.1 Expression en coordonnées cartésiennes passage aux coordonnées sphériques

L'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène sera écrite, en faisant l'approximation que le noyau (dont la masse est 1836 fois celle de l'électron) constitue le centre de gravité du système où il est immobile, ce qui revient à négliger son énergie cinétique. L'énergie cinétique de l'atome se réduit donc à celle de l'électron ; il lui est associé l'opérateur

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \tag{3.1}$$

L'énergie potentielle de l'atome, de nature purement électrostatique s'écrit en fonction de la distance  $r$  de l'électron au noyau.

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (3.2)$$

L'opérateur associé est la simple multiplication par  $V$ , et l'équation de Schrödinger dans coordonnées cartésiennes est

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x, y, z) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z) \quad (3.3)$$

Cette équation ne peut être résolue que par passage aux coordonnées sphériques, adaptées à la symétrie du système.

Définition des coordonnées sphériques :

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (3.4)$$

La transformation du lapacien en coordonnées sphériques, particulièrement fastidieuse, conduit à l'expression suivante de  $\hat{H}$ , en unités atomiques :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial \phi^2} \right] - \frac{e^2}{r} \quad (3.5)$$

Nous avons signalé que l'on peut mesurer simultanément une composante du moment cinétique orbital  $L$  et son carré  $L^2$ . Nous choisissons pour cette composante  $L_z$ , particularisée par la manière dont sont définies les coordonnées sphériques, que privilégie l'axe  $Z$  [20, 21] :

$$\hat{L}_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi}, \text{ Où } \hbar = 1 \quad (3.6)$$

$$\widehat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (3.7)$$

L'opérateur  $\widehat{H}$  prend alors la forme :

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\widehat{L}^2}{\hbar^2} \right] - \frac{e^2}{r} \quad (3.8)$$

Les trois opérateurs  $\widehat{H}$ ,  $L^2$  et  $L_z$  commutent : ils ont donc un ensemble commun de fonctions propres  $\Psi(r, \theta, \phi)$ . cette constatation fournit une stratégie de résolution de l'équation de Schrödinger, dont nous indiquerons les étapes sans entrer dans le détail des calculs.

Les fonctions de  $\widehat{H}$  dépendant de  $r, \theta, \varphi$  étant communes à  $L_z$  et  $L^2$ .

La séparation des variables, permet nous d'écrire la fonction d'onde comme [21, 22] :

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.9)$$

Où  $R_{n,l}(r)$  est une fonction de  $r$ , et satisfait à :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\widehat{L}^2}{\hbar^2} \right] - \frac{e^2}{r} \right] R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) = E R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.10)$$

En développant le premier membre et sachant que  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  est une fonction propre de  $L^2$  de valeur propre  $l\hbar^2(l+1)$  [22] :

$$L^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.11)$$

$$L_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) - \frac{\widehat{L}^2}{\hbar^2} R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \right] - \frac{e^2}{r} R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \\
= & ER_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)
\end{aligned} \tag{3.13}$$

D'après la projection, nous multiplions et divisons par  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  l'équation (3.13) devient [21, 22]:

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) - l(l+1) R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \right] - \frac{e^2}{r} R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \\
= & ER_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)
\end{aligned} \tag{3.14}$$

En utilisant le changement de variable :

$$R_{n,l}(r) = \frac{U(r)}{r} \tag{3.15}$$

On trouve :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} + \left[ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] U(r) = EU(r) \tag{3.16}$$

La solution de l'équation de Schrödinger :

$$\mathbf{1.} \quad \mathbf{r} \text{ tend vers zéro } (\mathbf{r} \longrightarrow 0) \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{1}{r^2} \gg V(r) \text{ et } \frac{1}{r} \gg E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] U(r) = 0 \tag{3.17}$$

A partir [21, 22, 23]:

$$U(r) \simeq r^\alpha \implies \alpha(\alpha-1)r^{\alpha-2} = l(l+1)r^{\alpha-2} \implies \begin{cases} \alpha_1 = l+1 \\ \alpha_2 = -l \end{cases} \quad (3.18)$$

$$\implies U(r) = r^{l+1} \quad (3.19)$$

**2. r** tend vers l'infini ( $r \rightarrow \infty$ )  $\iff V(r) \gg \frac{1}{r^2} \implies V(r) \rightarrow 0$

$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E U(r) = 0 \quad (3.20)$$

$$\implies U(r) = e^{-\lambda r} \quad (3.21)$$

Alors la solution est :

$$U(r) = r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r} \quad (3.22)$$

L'équation de Schrödinger devient de cette manière [24] :

$$\frac{\partial^2 f(r)}{\partial r^2} + 2 \left[ \frac{(l+1)}{r} - \lambda \right] \frac{\partial f(r)}{\partial r} + 2 \left[ \frac{-\lambda(l+1) + \frac{me^2}{\hbar^2}}{r} \right] f(r) = 0 \quad (3.23)$$

On a :

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k r^k \quad (3.24)$$

Donc :

$$\frac{b_k}{b_{k-1}} = \frac{2 \left[ \lambda(k+2) - \frac{me^2}{\hbar^2} \right]}{k(k+2l+1)} \quad (3.25)$$

Et on a :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (3.26)$$

$$\frac{b_k}{b_{k-1}} = \frac{2 \left[ \lambda(k+2) - \frac{1}{a_0} \right]}{k(k+2l+1)} \quad (3.27)$$

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k r^k \sim e^{2\lambda r} \quad (3.28)$$

En remplace (3.28) dans l'équation (3.22) :

$$U(r) = r^{l+1} e^{2\lambda r} e^{-\lambda r} = r^{l+1} e^{\lambda r} \quad (3.29)$$

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0 n^2} \quad (3.30)$$

$$R_{nl}(r) = \frac{U(r)}{r} = A_{nl} r^l e^{-\frac{r}{na_0}} \sum_{k=0}^N b_k r^k \quad (3.31)$$

Calcul  $R_{10}(r)$  :

$$l = 0, n = 1$$

$$\iff R_{10}(r) = 2(a_0)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (3.32)$$

Donc la solution de  $R_{nl}(r)$  est polynome de la guerre :

$$R_{nl}(r) = N_{nl} \left( \frac{2r}{na_0} \right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2r}{na_0} \right) \quad (3.33)$$

On a la normalisation :

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

On trouve :

$$N_{nl} = -\left( \frac{2}{na_0} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)}{2n [(n+1)]^3}}$$

Donc l'expression de  $R_{nl}(r)$  est :

$$R_{nl}(r) = -\left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \quad (3.34)$$

### 3.1.2 Atome d'hydrogène sur un espace non comutatif :

L'équation de Schrödinger sur un espace-temps non commutatif :

On a vu dans le chapitre 1 :

$$V(\vec{x}) * \Psi(\vec{x}) = V\left(x - \frac{\tilde{p}}{2}\right) \Psi(\vec{x}) \quad (3.35)$$

### 3.1.3 Hamiltonien non commutatif :

L'Hamiltonien non relativiste représentant l'atome d'hydrogène a l'expression suivante :

$$H(x, p) \longrightarrow H(\hat{x}, \hat{p}) \quad (3.36)$$

$$H(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (3.37)$$

Est le potentiel central créé par le proton de charge  $+|q|$  (le potentiel de coulomb)

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (3.38)$$

En termes de coordonnées non commutatives on écrit [25, 26, 27]:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} = -\frac{Ze^2}{\sqrt{\hat{x}_i \hat{x}_i}} \quad (3.39)$$

Nous utilisons maintenant le nouveau système de coordonnées :

$$x_i = \hat{x}_i + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_j$$

$$p_j = \widehat{p}_j$$

Dans le nouveau système de coordonnées, l'énergie cinétique  $\frac{p^2}{2m}$  reste invariante, par contre le potentiel coulombien devient [28, 29] :

$$\begin{aligned}
V(r) &= -\frac{Ze^2}{\sqrt{\widehat{x}_i \widehat{x}_i}} = -\frac{Ze^2}{\sqrt{(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j)(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \widehat{p}_j)}} \\
V(r) &= -\frac{Ze^2}{\sqrt{(x_i x_i - \frac{x_i \theta_{ij}}{\hbar} \widehat{p}_j + \vartheta(\theta^2))}} \\
V(r) &= -\frac{Ze^2}{\sqrt{(r^2 - \frac{x_i \theta_{ij}}{\hbar} \widehat{p}_j + \vartheta(\theta^2))}} \\
V(r) &= -\frac{Ze^2}{r \sqrt{(1 - \frac{x_i \theta_{ij}}{\hbar r^2} \widehat{p}_j + O(\theta^2))}} \\
V(r) &= -\frac{Ze^2}{r} (1 - \frac{x_i \theta_{ij}}{\hbar r^2} \widehat{p}_j + \vartheta(\theta^2))^{-\frac{1}{2}} \\
V(r) &= -\frac{Ze^2}{r} (1 + \frac{x_i \theta_{ij}}{2\hbar r^2} \widehat{p}_j + \vartheta(\theta^2)) \\
V(r) &= -\frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{2\hbar r^3} x_i \theta_{ij} \widehat{p}_j + \vartheta(\theta^2) \tag{3.40}
\end{aligned}$$

posons : [25]

$$\theta_{ij} = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \theta_k \quad \text{et} \quad \epsilon_{ijk} = \epsilon_{jki} = \epsilon_{kij} = 1 \tag{3.41}$$

$$\epsilon_{ikj} = \epsilon_{kji} = \epsilon_{ijk} = -1 \tag{3.42}$$

Donc : (3.40) à l'aide de (3.41) devient :

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{4\hbar r^3} \sum x_i \epsilon_{ijk} \theta_k \hat{p}_j + \vartheta(\theta^2)$$

On encore :

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{4\hbar^3} \frac{(\vec{L} \cdot \vec{\theta})}{r^3} \quad (3.43)$$

Donc l'opérateur Hamiltonien dans l'espace non commutative devient :

$$\begin{aligned} H(\hat{x}, \hat{p}) &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \\ &= \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{4\hbar^3} \frac{(\vec{L} \cdot \vec{\theta})}{r^3} \end{aligned} \quad (3.44)$$

D'après cette experssion on remarque que le non commutativité de l'espace-temps est introduit sous forme d'une perturbation.

## 3.2 Atome Hydrogénoide dans L'espace non commutatif

Un atome Hydrogénoide est un atome constitué d'un noyau et d'un seul électron à l'image de l'atome d'hydrogène qui est l'élément chimique le plus simple. Son étude permet de comprendre les principes de la structure atomique [30].

Pour résoudre de l'équation de Schrödinger pour les atomes Hydrogénoide en introduisant dans l'équation de Schrödinger un potentiel de type muoniques [29, 31].

Les atome muoniques sont des atomes hydrogénoide, peuvent être formés dans lesquels un muon est lié à un noyau de charge  $Ze$ ; de tels états sont appelés des atomes muoniques. Les muons sont des électrons lourds n qu'ils sont la même charge électrique  $e$  et spin  $\frac{1}{2}$  mais sont environ 207 fois plus lourds, le potentiel donc est [31] :

$$V^c(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r} & , r > R \\ -\frac{Ze^2}{2R}\left(3 - \frac{r^2}{R^2}\right) & , r < R \end{cases} \quad (3.45)$$

$$r = \sqrt{\widehat{x}_i \widehat{x}_i} \quad \text{avec} \quad \widehat{x}_i = x_i - \frac{\theta_{ij} \widehat{p}_j}{2\hbar}$$

Donc :

$$V^{nc}(r) = V^c(r) + \frac{Ze^2}{4\hbar} \overrightarrow{L} \overrightarrow{\theta} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{1}{R^3} \right) \quad (3.46)$$

Donc l'équation de Schrödinger dans l'espace non commutative :

$$\begin{aligned} & \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\widehat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) + \frac{Ze^2}{2r} \left( \frac{r^2}{R^2} - 3 \right) + \frac{Ze^2}{4r} \overrightarrow{L} \overrightarrow{\theta} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{1}{R^3} \right) \right] \Psi(\overrightarrow{r}, \theta, \varphi, t) \\ = & E \Psi(\overrightarrow{r}, \theta, \varphi, t) \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\Psi(\overrightarrow{r}, \theta, \varphi, t) = R_l(r) Y_{l, m_l}(\theta, \varphi) \quad (3.48)$$

Etude la partie radial :

$$\left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l(r) - \frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{Ze^2}{2R} \left( \frac{r^2}{R^2} - 3 \right) + \frac{Ze^2 m_l \theta_k}{4} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{1}{R^3} \right) - E \right) R_l(r) = 0 \quad (3.49)$$

On pose :

$$U(r) = r R_l(r) \quad (3.50)$$

On trouve :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)U(r) - \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3\right) + \frac{Ze^2 m_l \theta_k}{4} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{1}{R^3}\right) - E\right)U(r) = 0 \quad (3.51)$$

1.  $\mathbf{r}$  tend vers l'infini ( $\mathbf{r} \rightarrow \infty$ ) :

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}U(r) - \frac{2m}{\hbar^2} \left(E_0 - \frac{k}{2}r^2\right)U(r) = 0 \quad (3.52)$$

$$U(r) = e^{\frac{\alpha^2 r^2}{2}} H_n(\alpha r) \quad (3.53)$$

correspondant à

$$E_n = \left(n_n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (3.54)$$

$$\Psi = e^{\frac{\alpha^2 r^2}{2}} H_n(\alpha r) \quad (3.55)$$

2.  $\mathbf{r}$  tend vers zéro ( $\mathbf{r} \rightarrow 0$ ) :

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}U(r) - \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2 m_l \theta_k}{4r^3}\right)U(r) = 0 \quad (3.56)$$

la correction de l'énergie quand( $\mathbf{r} \rightarrow 0$ ) est :

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{Ze^2 m_l \theta_k}{4} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \quad (3.57)$$

Avec :

$l \neq 0$

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{Ze^2 m_l \theta_k}{4} \left( \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 (l+1)(l + \frac{1}{2})l} \right) \quad (3.58)$$

***Chapitre 4***  
***Solution de l'équation de***  
***Schrödinger avec le Potentiel***  
***de Kratzer***

# Chapitre 4

## Solution de l'équation de Schrödinger avec le Potentiel de Kratzer

### 4.1 Introduction

Le potentiel de Kratzer est une combinaison du potentiel de Coulomb et du potentiel carré inverse. En générale ce potentiel est utilisé pour étudier la structure atomique et moléculaire [32, 33], il est donc joue un rôle important dans le domaine chimie quantique. En mécanique quantique, les problèmes analytiques est résolubles sont limités [34]. Dans les systèmes quantiques le potentiel Kratzer est l'un des rares potentiels qui à existe une solution analytique exacte [35]. Les équations à potentielles de Kratzer dans l'espace commutatif a été étudiés dans ces références [36, 37, 38].

Le potentiel de Kratzer est défini par [40] :

$$V(r) = -2D \left( \frac{r_e}{r} - \frac{1}{2} \frac{r_e^2}{r^2} \right) \quad (4.1)$$

Avac un minimum de  $V(r) = -D$  (Fig.1). Que l'un des deux atomes être beaucoup

plus lourd que l'autre.

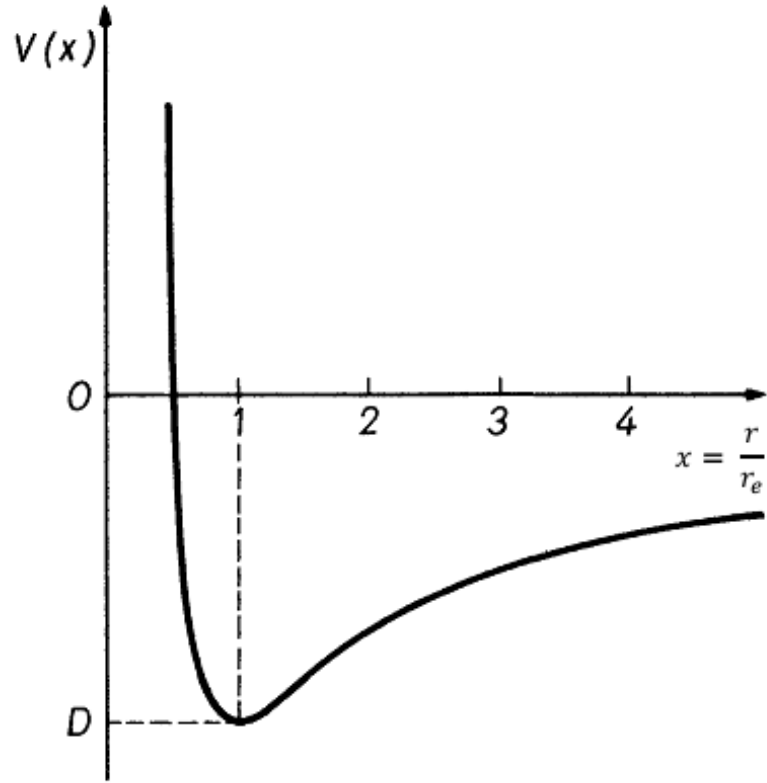


Fig.1.potentiel de Kratzer

En remplaçons le potentiel dans l'équation de Schrödinger :

$$\nabla^2 u + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E + 2D \left( \frac{r_e}{r} - \frac{1}{2} \frac{r_e^2}{r^2} \right) \right] u = 0 \quad (4.2)$$

On utilise le changement de variable :

$$U = \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (4.3)$$

En utilisant les abréviations dimensionnels :

$$x = \frac{r}{r_e} \quad ; \quad \beta^2 = -\frac{2mr_e^2}{\hbar^2} E \quad ; \quad \gamma^2 = \frac{2mr_e^2}{\hbar^2} D \quad (4.4)$$

On a  $\gamma > 0$  et  $\beta > 0$ , nous obtenons pour la partie radiale  $\chi_\ell$  l'équation différentielle :

$$\frac{\partial^2 \chi_\ell}{\partial x^2} + \left[ -\beta^2 + \frac{2\gamma^2}{x} - \frac{\gamma^2 + l(l+1)}{x^2} \right] \chi_\ell = 0 \quad (4.5)$$

Pour résoudre l'équation différentielle dernier ont recherché les comportements asymptotique de  $\chi_\ell$ , l'équation différentielle (3.5) à une singularité irrégulière quand  $x$  tend vers l'infini ( $x \rightarrow \infty$ ) où ses solutions normalisables dans les états liés, ces comportements est comme  $\chi_\ell = e^{-\beta x}$ .

Dans l'autre limite asymptotique  $x$  tend vers zéro ( $x \rightarrow 0$ ) dans ce cas  $\chi_\ell$  est proportionnel avec  $x^\lambda$ , où  $\lambda$  est un nouveau nombre quantique orbital [41] réalise l'équation suivante,

$$\lambda(\lambda - 1) = \gamma^2 + l(l + 1) \quad (4.6)$$

Les solutions de cette quadratique équation, en effet, nous avons besoin seulement les solutions positives lorsque  $\lambda > 1$  :

$$\lambda = \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + \left(l + \frac{1}{2}\right)^2} \quad (4.7)$$

On remarque que la fonction d'onde s'annule à  $r = 0$ , par conséquent

$$\chi_\ell(r) = x^\lambda e^{-\beta x} f(x) \quad (4.8)$$

mettre (4.8) dans (4.5) conduit à :

$$x f'' + (2\lambda x - 2\beta x) f' + (-2\lambda\beta + 2\gamma^2) f = 0 \quad (4.9)$$

Qui est du type général de l'équation de kummer de la série hypergéométrique confluyente en laquelle il peut être transformé, en utilisant la variable  $Z = 2\beta x$  au lieu de

$x$ . ceci conduit à :

$$f(x) = {}_1F_1\left(\lambda - \frac{\gamma^2}{\beta}; 2\lambda; 2\beta x\right) \quad (4.10)$$

Maintenant nous discutons séparément les deux cas d'énergie négatives et positives.

**a- énergies négatives :** pour les états liés  $\beta > 0$  la solution devient [40] :

$$\chi_l = x^\lambda e^{-\beta x} {}_1F_1\left(\lambda - \frac{\gamma^2}{\beta}; 2\lambda; 2\beta x\right) \quad (4.11)$$

Pour  $x$  prendre des grandes valeurs, dans ce cas  $x$  est proportionnelle avec  $e^{-\beta x}$  de telle sorte que  $\chi_l$  diverge pour  $x \rightarrow \infty$  si la série  ${}_1F_1$  ne se brise pas, si c'est le cas  ${}_1F_1$  est un polynôme et  ${}_1F_1 \rightarrow 0$  pour  $x \rightarrow \infty$  devient une normalisation, par conséquent :

$$\lambda - \frac{\gamma^2}{\beta} = -\nu \quad ; \quad \nu = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.12)$$

Cette relation conduit à les niveaux d'énergie pour les valeurs propres discrètes  $\beta$ .

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mr_e^2} \frac{\gamma^4}{(\nu + \lambda)^2} \quad (4.13)$$

On utilisant (4.7) nous trouvons :

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mr_e^2} \gamma^4 \left( \nu + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \gamma^2} \right)^{-2} \quad (4.14)$$

**b- énergies positive :** dans ce cas,  $\beta$  n'est plus réel mais il est purement imaginaire. sa définition montre que, en utilisant le nombre d'ondes  $k$ , nous écrivons ensuite  $\beta x = -ikr$ . Nous constituons dans l'équation (4.11) nous trouvons alors

$$\chi_\ell = r^\lambda e^{ikx} {}_1F_1\left(\lambda - i\frac{\gamma^2}{kr_e}; 2\lambda; -2ikr\right) \quad (4.15)$$

Les fonctions d'onde radiale (4.15) sont périodiques à grande distance entre les deux atomes, à l'exception du terme logarithmique.

Ce dernier est une conséquence asymptotique du potentiel de Coulomb . En interprétant le potentiel de Kratzer comme l'interaction de deux ions, chacun d'une charge électrique  $e$ , on obtient  $2Dr_e = e^2$ .

## 4.2 La solution d'équation de Schrödinger du potentiel de kratzer dans l'espace non commutative

Pour résoudre l'équation de Schrödinger du le potentiel de kratzer dans l'espace non commutative nous constituons la relation de Boopp's shift (2.38) dans e potentiel de kratzer (4.1)

On a :

$$\hat{x}_i = x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_j \quad (4.16)$$

Où

$$r = \sqrt{\hat{x}_i \hat{x}_i} \quad (4.17)$$

en effet :

$$\begin{aligned} V^{NC}(r) &= -2D \left( \frac{r_e}{\sqrt{\hat{x}_i \hat{x}_i}} - \frac{r_e^2}{2(\hat{x}_i \hat{x}_i)} \right) \quad (4.18) \\ &= -2D \left( \frac{r_e}{\sqrt{(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_j)(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_j)}} - \frac{r_e^2}{2(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_j)(x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} \hat{p}_j)} \right) \\ &= -2D \left( \frac{r_e}{(r^2 - \frac{\theta_{ij}}{\hbar} \hat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2))^{\frac{1}{2}}} - \frac{r_e^2}{2(r^2 - \frac{\theta_{ij}}{\hbar} \hat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2))} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -2D \left( \frac{r_e}{\left(1 - \frac{\theta_{ij}}{\hbar r^2} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2)\right)^{\frac{1}{2}}} - \frac{r_e^2}{2r^2 \left(1 - \frac{\theta_{ij}}{\hbar r^2} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2)\right)} \right) \\
&= \frac{-2Dr_e}{r} \left(1 + \frac{\theta_{ij}}{2\hbar r^2} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2)\right) + \frac{2Dr_e^2}{2r^2} \left(1 + \frac{\theta_{ij}}{\hbar r^2} \widehat{p}_j x_i + \vartheta(\theta^2)\right) \\
&= \frac{-2Dr_e}{r} + \frac{2Dr_e^2}{2r^2} - 2Dr_e \frac{\sum \varepsilon_{ijk} \theta_k \widehat{p}_j x_i}{4\hbar r^3} + 2Dr_e^2 \frac{\sum \varepsilon_{ijk} \theta_k \widehat{p}_j x_i}{4\hbar r^4}
\end{aligned}$$

Puisque :

$$\theta_{ij} = \frac{\varepsilon_{ijk} \theta_k}{2} \quad (4.19)$$

On a :

$$\begin{aligned}
\sum \varepsilon_{ijk} \theta_k \widehat{p}_j x_i &= (x_2 p_3 - x_3 p_2) \theta_1 + (x_3 p_1 - x_1 p_3) \theta_2 + (x_1 p_2 - x_2 p_1) \theta_3 \\
&= L_1 \theta_1 + L_2 \theta_2 + L_3 \theta_3 \\
&= \vec{L} \vec{\theta}
\end{aligned} \quad (4.20)$$

Alors :

$$V^{NC}(r) = -2D \left( \frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{Dr_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \quad (4.21)$$

Nous trouvons :

$$V^{NC}(r) = V^C(r) - \frac{Dr_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \quad (4.22)$$

On peut écrire l'opérateur Hamiltonien dans l'espace NC comme suit [16] :

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + V^{NC}(r) \quad (4.23)$$

L'équation du Schrödinger dans l'espace non commutative :

$$\widehat{H}\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) = E\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) \quad (4.24)$$

En remplace l'équation (4.21) dans l'équation (4.24) :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\widehat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) - 2D \left( \frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{Dr_e \vec{L} \cdot \vec{\theta}}{2\hbar} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right] \Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) = E\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) \quad (4.25)$$

On a :

$$\Psi(\vec{r}, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (4.26)$$

En remplace (4.26) dans (4.25) :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\widehat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) - 2D \left( \frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{Dr_e \vec{L} \cdot \vec{\theta}}{2\hbar} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right] R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) = ER_{nl}(r)Y_{lm} \quad (4.27)$$

On a :

$$\widehat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (4.28)$$

Il devient notre :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - 2D \left( \frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{Dr_e \vec{L} \cdot \vec{\theta}}{2\hbar} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right] R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) = ER_{nl}(r)Y_{lm} \quad (4.29)$$

### 4.2.1 Etude la partie angulaire

L'étude de la partie angulaire c'est le même calculé dans le cas commutative, on trouve  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  est :

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{4\pi}\right)^3 \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} (-1)^m p_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (4.30)$$

### 4.2.2 Etude la partie radial

On remarque que expression  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  ne depend pas de  $r$ .

Alors :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - 2D \left( \frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{Dr_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \right] R_{nl}(r) = ER_{nl}(r)$$

On utilise le changement de variable suivant :

$$R_{nl}(r) = \frac{U(r)}{r} \quad (4.31)$$

On trouve :

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \left( -2D \left( \frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{Dr_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) - E \right) U(r) = 0 \quad (4.32)$$

L'Hamiltonien  $\widehat{H}_\theta$  devient :

$$\widehat{H}_\theta = \frac{\widehat{p}^2}{2m} - 2D \left( \frac{r_e}{r} - \frac{r_e^2}{2r^2} \right) - \frac{Dr_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \quad (4.33)$$

D'après cette expression on remarque la non commutativité de l'espace-temps est introduit sous forme d'une perturbation.

$$\widehat{W}_\theta = -\frac{Dr_e \vec{L} \vec{\theta}}{2\hbar} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \quad (4.34)$$

$$\widehat{W}_\theta = -\frac{Dr_e L_z \theta}{2\hbar} \left( \frac{1}{r^3} - \frac{r_e}{r^4} \right) \quad (4.35)$$

Nous notons que le premier terme de l'expression ci-dessus est très semblable à celle de l'accouplage spin-orbite,

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

Et la non commutativité  $\theta$  joue un rôle de spin  $S$ .

nous traitons la non commutativité comme une perturbation pour trouver les corrections sur les niveaux d'énergie du potentiel de kratzer.

### 4.2.3 Correction des énergies d du potentiel de kratzer dans la géométrie no commutative

Les corrections du premier ordre de l'énergie s'écrivent :

$$\Delta E_n^{(1)} = \left\langle \psi_{n,l,m_l} \mid \widehat{W}_\theta \mid \psi_{n,l,m_l} \right\rangle \quad (4.36)$$

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{Dr_e\theta}{2\hbar} \int_0^\infty dr r^2 \int_0^{4\pi} \left[ \left\langle \psi_{n,l,m_l}^+ \mid \frac{L_z}{r^3} \mid \psi_{n,l,m_l} \right\rangle - \left\langle \psi_{n,l,m_l}^+ \mid \frac{r_e L_z}{r^4} \mid \psi_{n,l,m_l} \right\rangle \right] d\Omega \quad (4.37)$$

Utilisons l'écriture suivante :

$$\mid \psi_{n,l,m_l} \rangle = \mid n, l, m_l \rangle \quad (4.38)$$

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{Dr_e\theta m_l \hbar}{2\hbar} \left( \left\langle n, l, m_l \mid \frac{1}{r^3} \mid n, l, m_l \right\rangle - \left\langle n, l, m_l \mid \frac{r_e}{r^4} \mid n, l, m_l \right\rangle \right) \quad (4.39)$$

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{Dr_e\theta m_l}{2} \left( \left\langle n, l, m_l \mid \frac{1}{r^3} \mid n, l, m_l \right\rangle - \left\langle n, l, m_l \mid \frac{r_e}{r^4} \mid n, l, m_l \right\rangle \right) \quad (4.40)$$

Car :

$$\langle n, l, m_l \mid L_z \mid n, l, m_l \rangle = m_l \hbar \quad (4.41)$$

Remarquons que :

$$\left\langle n, l, m_l \mid \frac{1}{r^3} \mid n, l, m_l \right\rangle = \int_0^\infty dr r^2 R_{nl}^*(r) \frac{1}{r^3} R_{nl}(r) = \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \quad (4.42)$$

puisque :

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{nl}^*(r) R_{nl}(r) = 1 \quad (4.43)$$

Après [42] :

Les valeurs moyennes de  $\langle r^k \rangle_{nl}$ . Les différences entre les différentes fonctions propres radiales deviennent particulièrement apparentes lorsque nous formons la valeur moyenne de  $r$ , la distance entre l'électron et le noyau, élevée à différentes puissances. La valeur moyenne  $\langle r^k \rangle_{nl}$  est donnée par :

$$\frac{k+1}{n^2} \langle r^k \rangle_{nl} - (2k+1) \frac{a_0}{z} \langle r^{k-1} \rangle_{nl} + k \left[ l(l+1) + \frac{1-k^2}{4} \right] \frac{a_0^2}{z^2} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} = 0 \quad (4.44)$$

Démonstration la relation de récurrence (4.44) :

les valeurs d'attente  $\langle r^k \rangle_{nl}$  des différentes puissances de la variable radial  $r$  pour un atome d'hydrogène de nombre quantique  $n$  et  $l$  sont données par l'équation

Les valeurs  $\langle r^k \rangle_{nl}$  de différentes puissances de la variable radiale  $r$  pour un atome d'hydrogène de nombre quantique  $n$  et  $l$  sont données par l'équation

$$\langle r^k \rangle_{nl} = \int_0^{\infty} r^k [R_{nl}(r)]^2 r^2 dr \quad (4.45)$$

$R_{n,l}(r)$  sont les solutions de l'équation différentielle radiale  $HR(r) = ER(r)$ , nous montrons que ces valeurs sont liées par la relation de récurrence (4.44). pour simplifier la notion définissons la fonction réelle  $u(r)$  par  $u = rR_{n,l}$  et notons les première et seconde dérivées de  $u(r)$  par  $u'$  et  $u''$ .

L'équation ( 4.45 ) prend alors la forme :

$$\langle r^k \rangle_{nl} = \int_0^{\infty} r^k u^2 dr \quad (4.46)$$

Depuis que nous avons :

$$\frac{\partial R_{nl}(r)}{\partial r} = \frac{u'}{r} - \frac{u}{r^2} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R_{nl}(r)}{\partial r} \right) = ru'' \quad (4.47)$$

Apartir le relation :

$$HR(r) = ER(r)$$

Devient :

$$u'' = \left[ \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2z}{a_0 r} + \frac{z^2}{n^2 a_0^2} \right] u \quad (4.48)$$

Où l'équation  $E_n = -\frac{ze^2}{2a_0 n^2}$  pour l'énergie a également été introduite. Avant la commencer la dérivation direct de l'équation (4.44), nous dérivons d'abord la relation utile. considérons l'intégrale :

$$\int_0^{\infty} r^\nu uu' dr$$

On n'intègre par partie :

$$\int_0^{\infty} r^{\nu} uu' \partial r = r^{\nu} u^2 \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} u \frac{\partial}{\partial r} (r^{\nu} u) dr \quad (4.49)$$

La première partie de l'intégrée est disparait car quand  $R(r) \longrightarrow 0$ , ( $r \longrightarrow \infty$ ) et  $u(r) \longrightarrow 0$  comme  $r \longrightarrow 0$

Développant on dérivée l'intégrale à droite.

On a :

$$\int_0^{\infty} r^{\nu} uu' dr = -\nu \int_0^{\infty} r^{\nu-1} u^2 dr - \int_0^{\infty} r^{\nu} uu' dr$$

Combinant l'intégrale du coté gauche avec la dernière du coté droit, on obtient le résultat :

$$\int_0^{\infty} r^{\nu} uu' dr = -\frac{\nu}{2} \langle r^{\nu-1} \rangle_{nl} \quad (4.50)$$

Pour obtenir la relation de récurrence (4.44), on multiplie l'équation (4.48) par  $r^{k+1}u'$  et intégral sur  $r$ .

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' dr &= l(l+1) \int_0^{\infty} r^{k-1} uu' dr - \frac{2z}{a_0} \int_0^{\infty} r^k uu' dr + \frac{z^2}{n^2 a_0^2} \int_0^{\infty} r^{k+1} uu' dr \quad (4.51) \\ &= \frac{l(l+1)(k-1)}{2} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} + \frac{kz}{a_0} \langle r^{k-1} \rangle_{nl} - \frac{(k+1)z^2}{2n^2 a_0^2} \langle r^k \rangle_{nl} \end{aligned}$$

L'intégrale à gauche de l'équation (4.51) peut être écrit comme :

$$\begin{aligned}
\int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' dr &= - \int_0^{\infty} u' \frac{\partial}{\partial r} (r^{k+1} u') dr \\
&= -(k+1) \int_0^{\infty} r^k u' u' dr - \int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' dr \\
&= (k+1) \int_0^{\infty} u \frac{\partial}{\partial r} (r^k u') dr - \int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' dr \\
&= k(k+1) \int_0^{\infty} r^{k-1} u u' dr + (k+1) \int_0^{\infty} r^k u u'' dr - \int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' dr \quad (4.52)
\end{aligned}$$

L'intégrale du coté gauche et la dernière intégrale du cote droit peuvent etre combinées pour donner :

$$\int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' dr = -\frac{k(k-1)(k+1)}{4} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} + \frac{(k+1)}{2} \int_0^{\infty} r^k u u'' dr \quad (4.53)$$

et cela en utilisant l'équation (4.50)

Substitution l'équation (4.48) pour  $u''$  dans la dernière intégrale du cote droit de l'équation (4.53) :

$$\begin{aligned}
\int_0^{\infty} r^{k+1} u' u'' dr &= -\frac{(k-1)k(k+1)}{4} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} + \frac{(k+1)l(l+1)}{2} \langle r^{k-2} \rangle_{nl} \quad (4.54) \\
&\quad -\frac{(k+1)z}{a_0} \langle r^{k-1} \rangle_{nl} + \frac{(k+1)z^2}{2n^2 a_0^2} \langle r^k \rangle_{nl}
\end{aligned}$$

En fin, combinant les équations (4.51) et (4.54), nous obtenons la relation de récurrence (4.44 ).

Maintenant, utilisez la relation (4.44) pour  $k = (0, 1, -1)$  on trouve [42]

pour  $k = 0$

$$\langle r^{-1} \rangle = \frac{Z}{a_0 n^2} \quad (4.55)$$

pour  $k = 1$

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

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2Z} [3n^2 - l(l+1)] \quad (4.56)$$

pour  $k = -1$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z}{l(l+1)a_0} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \quad (4.57)$$

et a partir de [42] on a :

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l + \frac{1}{2})} \quad (4.58)$$

On remplace (4.58) dans (4.57) :

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 (l+1)(l + \frac{1}{2})l} \quad (4.59)$$

Finalement [43] :

$$\left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle = \frac{z^4 \frac{1}{2} [3n^2 - l(l+1)]}{a_0^4 n^5 (l + \frac{3}{2})(l+1)(l + \frac{1}{2})l(l - \frac{1}{2})} \quad (4.60)$$

Maintenant, calculons la première correction de l'énergie  $\Delta E_n^{(1)}$ , en remplace les équations(4.59) et (4.60) dans (4.40) :

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{Dr_e \theta m_l}{2} \left( \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle - \left\langle \frac{r_e}{r^4} \right\rangle \right) \quad (4.61)$$

$$= -\frac{Dr_e\theta m_l}{2} \left( \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l} - \frac{r_e Z^{4\frac{1}{2}} [3n^2 - l(l+1)]}{a_0^4 n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} \right) \quad (4.62)$$

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

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

$$= -\frac{Dr_e\theta m_l}{2} \left( \frac{Z^3 a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2}) - r_e Z^{4\frac{1}{2}} [3n^2 - l(l+1)]}{a_0^4 n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} \right) \quad (4.63)$$

On pose :

$$g_1 = Dr_e^2 \quad (4.64)$$

$$g_2 = 2Dr_e \quad (4.65)$$

Donc :

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{g_2 \theta m_l Z^3 a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2})}{4a_0^4 n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} + \frac{g_1 \theta m_l Z^{4\frac{1}{2}} [3n^2 - l(l+1)]}{2a_0^4 n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} \quad (4.66)$$

Quand  $g_1 = 0$  le potentiel de Kratzer réduit au potentiel du Coulomb, et donc l'équation (4.66) deviendra :

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{g_2 \theta m_l Z^3 a_0 n^2 (l+\frac{3}{2})l(l-\frac{1}{2})}{a_0^4 n^5 (l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} \quad (4.67)$$

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{g_2 \theta m_l Z^3}{4a_0^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l} \quad (4.68)$$

Cette équation est le meme resultat de sepectre d'énergie ordre 1 de atome de hydrogène [7].

$$\begin{aligned} Z &= 1 \\ g_2 &= 2Dr_e = Ze^2 = e^2 \\ \Delta E_n^H &= -\frac{e^2 \theta m_l}{4a_0^3 n^3 l(l+1)(l+\frac{1}{2})} \end{aligned} \quad (4.69)$$

La formule (4.66) montre l'effet de l'algèbre non commutative sur les niveaux d'énergie du potentiel de Kratzer. Il peut être utilisé pour étudier des plusieurs caractéristiques des molécules diatomiques. En particulier, cela nous permet d'étudier l'effet de la non-commutativité sur les niveaux d'énergie pour les molécules diatomiques.

## Spectre d'énergie

Nous prenons comme exemple les niveaux  $n = 1$

Quand  $l = 1 \rightarrow -l \leq m \leq l$

$$\rightarrow m = -1, 0, 1$$

nous étudions les trois cas :

·  $l = 1, m = -1$

$$\Delta E_n^{(1)} = +\frac{g_2 \theta Z^3}{12a_0^3} - \frac{g_1 Z^4}{15a_0^3}$$

·  $l = 1, m = 0$

$$\Delta E_n^{(1)} = 0$$

·  $l = 1, m = +1$

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{g_2 \theta Z^3}{12a_0^3} + \frac{g_1 Z^4}{15a_0^3}$$

# Conclusion

Le but de cet mémoire est de résoudre l'équation de Schrodinger pour potentiel de Kratzer dans le formalisme de la géométrie de l'espace non commutative. Cette non commutativité a été considéré comme une perturbation indépendante du temps. Elle a conduit à un simple déplacement de vecteur de position  $x_i$  à un vecteur équivalent  $\hat{x}_i$  défini par la relation  $\hat{x}_i = x_i - \frac{\theta_{ij}}{2\hbar} p_j$  qui dépend de paramètre du non commutativité  $\theta$ , en démontrant les corrections d'énergie jusqu'au second ordre du la coefficient non commutativité  $\theta$ .

# Bibliographie

- [1] W. Heisenberg ,”Letter to R. Peierls (1930), in ’Wolfgang Pauli, Scientific Correspondence’, Vol. III, p.15, Ed. K.Von Meyenn“, (Springer Verlag1985).
- [2] H.S. Snyder, “Quantizedspace-time”, Phys.Rev., 71, 38 (1947).
- [3] A. Connes, non differential Géométry, Publ. Math. I.H.E.S. 62 257-360(1985).
- [4] A. Connes, non commutative Géométry year 2000, math.QA/0011193.
- [5] MThomas KRAJEWSKI, non-commutative geometry and fundament interaction, Ph.D. Thesis, math-ph/9903047.
- [6] Richard J. Szabo Quantum Field Theory on Noncommutative Spaces.
- [7] Begui Mohamede, calcule des éléments de matrice dipolaire dans une Géométrie Non Commutative, le diplôme de Magister de UNIVERSITE D’EL-OUDE, 2013
- [8] Matthieu Lefrançois Théorie des champs topologiques et mécanique quantique en espace non-commutatif Thèse de Doctorat Soutenue le 5 décembre 2005 à l’Université Claude Bernard Lyon-I.
- [9] A. Micu and M. M. Sheikh- Jabbari, Non commutative  $\Phi^4$  Theory at Two Loops, JHEP 0101 (2001) 025, hep-th/0008057.
- [10] Bose, S. K., Exact solution of non-relativistic Schrödinger equation for certain central physical potentials, NouvoCimento B. 113 (1996) 299- 328 .
- [11] L. Buragohain and S. A. S .Ahmed, Exactly solvable quantum mechanical systems generated from the anharmonic potentials, Lat. Am. J. Phys. Educ. Vol. 4, No. 1, 79-83 (2010).

- [12] A. Niknam, A. A. Rajab and M. Solaimani, Solutions of D-dimensional Schrödinger equation for Woods-Saxon potential with spin-orbit, coulomb and centrifugal terms through a new hybrid numerical fitting Nikiforov-Uvarov method, J Theor App Phys, (2015) DOI 10.1007/s40094-0150201-9.
- [13] Cosmas K. Zachos, David B. Fairlie, Thomas L. Curtright, “Quantum Mechanics In Phase Space”, World Scientific Series in 20th Century Physics, 34
- [14] J. L. Basidevant, Mécanique Quantique, ellipses, ISBN 2-7298-8614-1 (1986), Paris, France.
- [15] E. Elbaz, Quantum, The quantum theory of particles, Fields, and Cosmology, Springer, ISBN 3-540-62093-1(1995), New York, USA.
- [16] TARFAYA CHAHIRA, Solution de l'équation de Schrödinger pour les atomes HydrogénéoIde dans l'espace Non commutative, mémoire Master, Université Mohamed Boudiaf - M'sila 2018
- [17] Luca Mezincescu, « Star Operation in Quantum Mechanics », (2000), hep-th/0007046.
- [18] DEFFAF ABLA, Solution de l'équation de Schrödinger dans l'espace non Commutative avec plusieurs types d'interactions, mémoire de Master, Université Mohamed Boudiaf - M'sila 2016.
- [19] Nawel Rezaiki, L'Atome d'Hydrogène dans le Formalisme de la Géométrie Non Commutative, le diplôme de Magister de UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE,
- [20] E. Kartheuser, Elements de mécanique quantique , Tome 2, cour à département physique l'université de Liège.
- [21] Claude Aslangul, Mécanique quantique \_ Tome 2, Développements et applications à basse énergie, De Boeck Supérieur (2008)
- [22] Prof. Minh Quang TRAN, Cours Physique générale IV, 2009, <https://crppwww.epfl.ch/phsgen4/>.

- [23] Claude ASLANGUL, Applications de la Mécanique Quantique, université pierre et curie, 2005-2006.
- [24] David j. Griffiths, introduction to Quantum mechanics, Pearson Education International, 1995
- [25] M. Chaichian, M. M. Sheikh-Jabbari, A. Tureanu, Hydrogen Atom Spectrum and the Lamb Shift in Non-commutative QED, Phys. Rev. Lett. 86(2001) 2716, hep-th/0010175.
- [26] Nawel Rezaiki, L'Atome d'Hydrogène dans le Formalisme de la Géométrie Non Commutative, le diplôme de Magister de UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE.
- [27] M. Chaichian, M. M. Sheikh-Jabbari, A. Tureanu, Comments on the Hydrogen Atom Spectrum in the Noncommutative Space, Eur. Phys. J. C 36 (2002)251, hep-th/0212259.
- [28] Behrouz Mirza et al., Relativistic Oscillators in a Non-commutative space in a Magnetic field, Commun. Theor.Phys. 55 (2011) 405-409.
- [29] V. Galitski , B. Karnakov, problèmes de mécanique quantique, Mir Publishers, 1985
- [30] Sylvain Reynal, Le cours de physique de l'ENSEA-Physique quantique (semestre 2), 2012-2013, <http://www-reynal.ensea.fr/teaching/quantum/>
- [31] Richard W. Robinett , Quantum Mechanics , Classical Results, Modern Systems, and Visualized Examples, Second Edition, Oxford University Press, 2006
- [32] A. Kratzer, Z. Phys. 3 (1920) 289.
- [33] R.J. Le Roy and R.B. Bernstein, J. Chem. Phys. 52 (1970) 3869.
- [34] L.I. Schiff, Quantum Mechanics, 3rd ed., McGraw-Hill Book Co., New York (1968)
- [35] S.M. Ikhdair and R. Sever, Cent. Eur. J. Phys. 6 (2008) 697 ; S.M. Ikhdair and R. Sever, J Math Chem . 45, 1137 (2009) ; S.M. Ikhdair, R. Sever, J. Mol. Struct. :Theochem.806, 155 (2007) ; S.M. Ikhdair, R. Sever, J. Mol.
- [36] Struc. :Theochem.855, 13 (2008)

- [37] M.R. Setare and E. Karimi, Phys. Scr. 75 (2007) 90.
- [38] D. Bouaziz, Ann. Phys. 355 (2015) 269.
- [39] L.K. Sharma and J. Fiase, Chin. Phys. Lett. 21 (2004) 1893.
- [40] S. Flügge, Practical quantum mechanics, (Springer-Verlag, 1994), pp. 178-182.
- [41] M. Moumni, et al., Afr. Rev. Phys. 7 (2012) 0010.
- [42] DONALD D. FITTS, Principles of quantum mechanics, ambridge university press,  
Second edition 2002
- [43] HANS A.BETHE and EDWIN E.SALPETER, Quantum Mechanics of one and tow  
electron atoms, Academic Press Inc. Ill Fifth Avenue, New York 3, New York/ USA.  
1957.

## ملخص

في هذا البحث وضحنا أهمية نموذج الهندسة غير تبديلية في دراسة كراتزر وهذا من خلال ابراز التصحيحات الطاقوية حتى الرتبة الثانية لمعامل غير التبديلي  $\theta$  وهذا بكل معادلة شرودينغر باستخدام الهندسة غير تبديلية.

**الكلمات المفتاحية:** الهندسة غير التبديلية، معادلة شرودينغر، كراتزر.

## Résumé

Dans ce travail, nous avons utilisé la géométrie non commutative par l'étude du potentiel Kratzer en démontrant les corrections d'énergie jusqu'au second ordre du le coefficient non commutative  $\theta$  cela peut être fait par l'étude de l'équation de Schrödinger dans la géométrie non commutative.

**Mots-clés:** la géométrie non commutative, équation de Schrödinger, potentiel du kratzer.

## Abstract

In this work, we have used noncommutative geometry by studying Kratzer's potential by considering the second order corrections in the the non commutative coefficient  $\theta$ , this can be done by studying the equation of Schrödinger.

**Keywords:** noncommutative geometry, equation of Schrödinger, kratzer's potential.