



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

SAOUDI Samira

THEME

Formalisme de Hamilton-Jacobi pour un hamiltonien
hermétique, une application sur
un oscillateur harmonique

Soutenue le : 24/06/2013

Devant le jury composé de :

Y. Sabri	MAB	Université de M'sila	Président
E. REDOUANE-SALAH	MCB	Université de M'sila	Rapporteur
O. Mebarki	MAA	Université de M'sila	Examineur

Promotion Juin 2013

Remerciements

*Je tiens à remercier très vivement madame **E. Redouane-Salah**, MCB à l'Université de M'Sila pour avoir proposé et dirigé mes travaux de recherche. Ses compétences et ses bonnes directives m'ont aidé à achever ce mémoire de master. Merci aussi pour son attention et ses exigences pendant la période de rédaction du mémoire.*

*Je remercie Monsieur **Y. Sabri**, MAB à l'Université de M'Sila pour avoir accepté de présider le jury de soutenance de ce mémoire.*

*Je remercie **O. Mebarki**, MAA à l'Université de M'Sila pour m'avoir apporté son soutien et son aide durant l'exécution de mes travaux et pour avoir accepté de faire partie de ce jury en tant qu'examinateur.*

Je tiens à remercier tous les enseignants du département de physique qui ont contribué à ma formation par leurs conseils et leurs orientations.

Enfin, je saurais oublier de remercier tous mes collègues de la promotion 2013.

Saoudi samira

Juin 2013

Dédicace

*C'est avec un immense honneur et une grande simplicité que je dédie ce
modeste besogne à :*

Celui et celle qui m'ont donné la vie :

*A Mon Père qui a toujours été là pour moi, et qui ma donnée un magnifique
modèle de labeur et de persévérance. J'espère qu'il trouve dans ce travail
toute ma reconnaissance et tout mon amour.*

*Ma Mère pour toute sa tendresse, amour et affection qui ont été pour moi
une lumière et un appui d'une valeur inestimable, je te prie Mère de trouver
ici le témoignage de mes sentiments les plus distingués et s'il y quelqu'un au
monde envers qui je dois beaucoup, ça serait toi Mère et quoique je fasse
jamais je ne pourrai revaloir ce tu m'a donné avec cœur et âme .*

*A mon frère ELKHAIR et sa femme et son enfants ANTER et RITADJ.
A mes sœur : AKILA, son marie ALAID et les petits enfants DJABER et
OUMAYMA.*

CHAHRA, son marie ABDRAZZAK et son enfant MOUHAMED.

A ma très belle rose, ma petite sœur AHLAM.

A mon frère ABDELHAK.

A mes sœurs FADILA et THELDJA.

A toute la famille SAOUDI et ATTOUI.

A qui m'aide de près et de loin.

A toutes mes amies.

Saoudi samira

Tables des matières

Introduction générale	1
 <i>Chapitre I : Formalisme Quantique de Hamilton-Jacobi</i>	
I.1 Introduction	3
I.2 La Théorie de Hamilton-Jacobi en mécanique classique	3
I.2.1 Formalisme de Lagrange	3
I.2.1.1 Coordonnées généralisées	3
I.2.1.2 Espace de configuration	3
I.2.1.3 Lagrangien	4
I.2.1.4 Equation d'Euler-Lagrange	4
I.2.2 Formalisme de Hamilton	5
I.2.2.1 Espace de phase	5
I.2.2.2 Equations canoniques de Hamilton	5
I.2.2.3 Transformations canoniques	6
I.2.3 Formalisme de Hamilton-Jacobi	10
I.2.3.1 L'action de Hamilton-Jacobi	10
I.2.3.2 Fonction principale	11
I.2.3.3 Equation de Hamilton-Jacobi	12
I.2.3.4 Solution de l'équation de Hamilton-Jacobi	12
I.3 Importance de l'approche de Hamilton-Jacobi dans la solution des équations dynamiques pour des mouvements périodiques	13
I.3.1 Solution de l'équation dynamique par la méthode de Hamilton-Jacobi	13
I.3.2 L'équation de Schrödinger	15
I.4 Formalisme de Hamilton-Jacobi en mécanique quantique	17
I.4.1 Équation de Hamilton Jacobi et la Fonction Caractéristique	17
 <i>Chapitre II : Solution de l'équation de Schrödinger par la méthode de Hamilton-Jacobi</i>	
II.1 Introduction	19
II.2 Etude d'un hamiltonien hermétique d'un oscillateur harmonique ordinaire	19
II.2.1 Etude classique de l'oscillateur harmonique	19
II.2.1.1 Cas classique	20
II.2.2 Etude Analytique de l'oscillateur harmonique	21

II.2.2.1 Lagrangien	21
II.2.2.1.a Les équations de mouvement	21
II.2.2.2 L'hamiltonien	22
II.2.2.2.a Les équations de mouvement	22
II.2.3 Etude quantique de l'oscillateur harmonique	23
II.2.3.1 les valeurs propres de H (énergies)	23
II.2.3.1.a les opérateurs de création et d'annihilation	23
II.2.3.1.b les valeurs propres de N	25
II.3 Equation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique	26
II.4 Solution de l'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique en mécanique quantique	26
II.5 Etude de spectre de l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique par la méthode de Hamilton-Jacobi	30
II.5.1 La solution par la méthode de Hamilton-Jacobi	30
II.5.1.1 L'action quantique de Hamilton Jacobi $J(E)$	32
II.5.1.2 Application du théorème des résidus	32
II.5.1.3 Action quantique de Hamilton-Jacobi et valeurs propres des énergies	33
II.5.2 Application à l'oscillateur harmonique	34
II.5.2.1 Les valeurs propres	34
II.5.2.2 Développement en série de Laurent	35
II.5.2.3 L'action Quantique	37
II.5.2.4 Les vecteurs propres	39
II.5.3 L'oscillateur de Morse	42
II.5.3.1 Spectre des énergies de l'oscillateur de Morse	42
II.5.3.2 La règle de quantification et les valeurs propres	46
II.5.3.3 Fonction d'onde de l'oscillateur de Morse	47

Chapitre III : Etude d'un hamiltonien non hermitique et \mathcal{PT} -symétrique

III.1 Introduction	50
III.2 L'opérateur de la parité \mathcal{P} et l'opérateur renversement de temps \mathcal{T}	50
III. 2.1 L'opérateur de la parité \mathcal{P}	50
III.2.2 L'opérateur renversement de temps \mathcal{T}	50
III.3 L'hamiltonien et la condition de l'herméticité de Dirac en mécanique	

quantique	51
III.3.1 Propriétés de l'opérateur hermétique	51
III.4 La symétrie réflexion espace-temps et l'opérateur \mathcal{PT}	52
III.4.1 Définitions et propriétés de \mathcal{PT} -symétrie	52
III.5 Hamiltonien non hermétique et \mathcal{PT} -symétrique	52
III.5.1 Exemples physique de quelques hamiltoniens non-hermétique	53
III.5.2 Valeurs propres réelles d'un hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique	53
III.6 Etude du spectre d'un hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique par la méthode de Hamilton- Jacobi	55
 Conclusion générale	 58
 Annexes	 59
A polynôme d' Hermite	59
B Théorème des résidus	60
 Bibliographie	 62

Introduction générale

La mécanique quantique est la description du comportement de la matière et de la lumière, à l'échelle microscopique. Les études approfondies sur le comportement microscopique de la matière, durant le premier quart du dernier siècle, ont données des informations très importantes sur la façon dont la matière se comporte et a conduit ensuite à la formulation de la théorie quantique par Schrödinger, Heisenberg et Dirac.

En 1926 le physicien autrichien Erwin Schrödinger proposa la fameuse équation dite équation de Schrödinger c'est l'équation fondamentale de la mécanique quantique elle décrit les états stationnaires, et dans sa forme dépendante du temps, l'évolution temporelle de l'état du système.

Le formalisme mathématique de la mécanique analytique développé par Joseph-Louis Lagrange (1736-1813), a conduit à une généralisation des principes de la mécanique newtonienne à des systèmes dynamiques, il mettait en jeu une fonction L de l'espace de configuration du système (espace des couples position-vitesse).

L'autre approche de la mécanique analytique est le formalisme hamiltonien (William Rowan Hamilton, 1805-1865), ce formalisme introduit une fonction H , qui est définie sur l'espace des phases (espace des couples position-impulsion), cette fonction est l'hamiltonien du système et correspond à l'énergie total du système.

Le formalisme quantique de Hamilton-Jacobi, a été développé par Leacock et Padgett (1983), c'est une approche à l'étude des problèmes solubles en mécanique quantique, ce formalisme est une méthode importante et simple pour déterminer le spectre d'énergies. L'avantage de cette méthode c'est qu'elle donne la possibilité de déterminer les valeurs propres d'énergie sans devoir résoudre l'équation de mouvement. Ce formalisme est l'objet essentiel de ce travail.

L'un des postulats élémentaires de la mécanique quantique, l'hamiltonien H doit vérifier la condition de l'hermiticité de Dirac dont les valeurs propres sont des réelles, en 1998, Bender et Boettcher ont présenté une alternative à ce postulat, où la condition de l'hermiticité de l'hamiltonien pour avoir un spectre réel n'est pas exigée, cette condition

est remplacée par la symétrie de réflexion d'espace-temps (\mathcal{PT} -symétrique) sans violer aucun des axiomes physiques de la mécanique quantique.

Dans ce travail de mémoire, nous avons effectué une étude par la méthode de Hamilton-Jacobi sur deux systèmes d'oscillateurs, le premier système est un oscillateur harmonique unidimensionnel, le deuxième est un oscillateur de Morse, nous avons calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de chaque système et puis nous avons fait une extension de cette méthode sur un hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique.

Ce mémoire est constitué de trois chapitres sont structuré comme suit :

Dans le premier chapitre, nous avons étudié le formalisme de Hamilton-Jacobi en mécanique classique et en mécanique quantique.

Dans le deuxième chapitre nous avons exposé une étude sur l'oscillateur harmonique à une dimension dans les cas classique, analytique et quantique. Nous avons résolu l'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique en mécanique quantique on a obtenu les valeurs propres et les fonctions propres, et puis nous avons effectué une étude détaillée sur le même problème en mécanique quantique en utilisant la méthode de Hamilton-Jacobi, nous avons également étudié un autre type d'oscillateurs dit oscillateur de Morse par la méthode de Hamilton-Jacobi.

Dans le troisième chapitre, on a exposé quelques notions essentielles concernant le théorème des hamiltoniens \mathcal{PT} -symétrique, l'opérateur de la parité \mathcal{P} , et l'opérateur de renversement de temps \mathcal{T} , les hamiltoniens non hermétiques et \mathcal{PT} -symétriques, on a essayé d'appliquer la méthode de Hamilton-Jacobi sur un hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique en employant le hamiltonien de Scarf.

Chapitre I :

*Formalisme quantique de Hamilton-
Jacobi*

I.1 Introduction

La méthode de Hamilton Jacobi est un formalisme bien connu dans la mécanique classique, qui fournit une méthode puissante pour résoudre des équations dynamiques, il est considéré comme extension à la théorie classique, le formalisme des transformations et de la formulation canoniques de Hamilton-Jacobi peut être aussi prolongé à la mécanique quantique.

I.2 La Théorie de Hamilton-Jacobi en mécanique classique:

I.2.1 Formalisme de Lagrange:

I.2.1.1 Coordonnées généralisées:

La mécanique non relativiste définit la position d'une particule par la fonction $\vec{r}(t)$, pour la détermination de la position d'un système de N points, donc on a N vecteurs positions dépendant, avec 3N coordonnées $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$, alors le système possède q_i coordonnées, $(i = 1, \dots, 3N)$, on appelle q_i les coordonnées généralisées [1.2].

La position de N points matériels est définie par un vecteur d'un espace à 3N dimensions.

$$\vec{r} = \vec{r}(q_1, \dots, q_{3N}) \in R^{3N}$$

Et

$$\dot{\vec{r}} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \sum_i \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \dot{q}_i$$

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \quad (\text{I.1})$$

I.2.1.2 Espace de configuration:

La représentation instantanée d'un système peut être décrite par les valeurs de n coordonnées indépendantes par définition : q_1, q_2, \dots, q_n .

Il lui correspond un point particulier dans un espace à n dimension dit espace de configurations [3].

I.2.1.3 Lagrangien:

Tout système mécanique est caractérisé par une fonction de Lagrange ou lagrangien $L(q, \dot{q}, t)$, dépendant de la coordonnée q , de sa dérivée par rapport au temps $\dot{q} = dq/dt$, tel que le lagrangien L est la différence entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle, par exemple pour une particule dans un potentiel $V(q, t)$, on a:

$$L = T - V = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q, t) \quad (I.2)$$

I.2.1.4 Equation de Euler-Lagrange:

L' intégrale suivant, s'appelle l'action.

$$S = \int dt L \quad (I.3)$$

Considérons $L = L(q, \dot{q}, t)$, prenons une seule coordonnée, pour simplifier. Soit $q(t)$ qui minimise S (l'action) on calcule S pour $q(t) + \delta q(t)$, où $\delta q(t)$ est quelconque.

Avec

$$\begin{aligned} \delta q(t_1) &= \delta q(t_2) = 0 \\ \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) dt - L(q, \dot{q}, t) dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right) dt \end{aligned} \quad (I.4)$$

Une intégration par partie du deuxième terme donne:

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial q} \delta q dt + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right] - \int \delta q \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) dt \quad (I.5)$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right] \delta q dt \quad (I.6)$$

On doit avoir $\delta S = 0$ pour δq quelconque il faut:

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = 0 \quad (I.7)$$

Cette équation s'appelle l'équation d'Euler-Lagrange.

Pour toutes les coordonnées généralisées, les équations d'Euler-Lagrange sont:

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = 0 \quad (I.8)$$

I.2.2 Formalisme de Hamilton:

I.2.2.1 Espace de phase:

On appellera espace des phases l'espace à $2n$ dimensions dans lequel un point est repéré par les $2n$ coordonnées indépendantes $q_1, q_2, \dots, q_n ; p_1, p_2, \dots, p_n$ (position-impulsion).

I.2.2.2 Equations canoniques de Hamilton:

On a dit que l'hamiltonien, l'état d'un système physique ayant n degrés de liberté est spécifié par n coordonnées généralisées q_i ($i = 1, \dots, n$) et n moments conjugués (impulsions généralisées) p_i . Ces derniers sont définis en fonction du lagrangien comme suite:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (\text{I.9})$$

On définit ensuite la fonction de Hamilton ou l'hamiltonien:

$$H(p, q, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}, t) \quad (\text{I.10})$$

La différentielle totale de cette équation pour le premier membre:

$$dH = \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt \quad (\text{I.11})$$

La différentielle du second membre s'écrit:

$$dH = dp_i \dot{q}_i + p_i d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (\text{I.12})$$

On utilise la définition des moments généralisés $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ et les équations de Lagrange

$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}$ pour obtenir:

$$dH = \dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

On compare à l'équation (I.10).

$$dH = \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt$$

Ce qui donne les équations canoniques de Hamilton:

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \\ \frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial t} \end{cases} \quad (\text{I.13})$$

Si le Lagrangien L ne dépend pas explicitement du temps.

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0 \rightarrow \frac{\partial H}{\partial t} = 0$$

Alors l'énergie est conservée

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \rightarrow \frac{d}{dt}H = 0$$

I.2.2.3 Transformations canoniques:

Considérons les fonctions Q_i et P_i de variables p, q, t apparaissant dans le formalisme de Hamilton :

$$Q_i = Q_i(p, q, t)$$

Et (I.14)

$$P_i = P_i(p, q, t)$$

S'il existe une fonction (Q, P, t) , les équations de mouvement s'écrivent sous la forme:

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \quad (\text{I.15})$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}$$

Cette transformation est dite canonique et K joue le rôle de l'hamiltonien d'où:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) \right] dt = 0 \quad (\text{I.16})$$

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t) \right] dt = 0 \quad (\text{I.17})$$

Considérons une fonction arbitraire F appelée fonction génératrice de la transformation. Cette fonction décrite avec deux variables indépendantes parmi p, q, P, Q , donc on peut obtenir quatre cas possibles [2].

1^{er} Cas: $F = F_1(q, Q, t)$

Dans les deux équations (I.16) et (I.17) on ne peut pas dire que les intégrales sont égaux alors:

$$\sum p_i \dot{q}_i - H = \sum P_i \dot{Q}_i - K + \frac{dF_1}{dt}$$

Et la dérivation de la fonction F_1 par rapport à t

$$\frac{dF_1}{dt} = \sum_i \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

Comparer les deux relations précédentes, on obtient

$$\left\{ \begin{array}{l} p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \\ P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \\ K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t} \end{array} \right. \quad (I.18)$$

2^{ème} Cas: $F = F_2(q, P, t)$

Dans le cas précédent nous avons :

$$P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}$$

Soit

$$F_1 = -\sum_i P_i Q_i + F_2 \quad \text{et} \quad F_2 = F_1 + \sum_i P_i Q_i$$

On a aussi

$$\sum p \dot{q} - H = \sum P \dot{Q} - K + \frac{dF_1}{dt}$$

Et

$$\frac{dF_1}{dt} = -\sum (\dot{P}Q + P\dot{Q}) + \frac{dF_2}{dt}$$

$$\begin{aligned}
\sum p \dot{q} - H &= \sum (P \dot{Q} - \dot{P}Q - P\dot{Q}) - K + \frac{dF_2}{dt} \\
&= -\sum \dot{P}Q - K + \frac{dF_2}{dt} \\
&= -\sum \dot{P}Q - K + \frac{\partial F_2}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial F_2}{\partial P} \dot{P} + \frac{\partial F_2}{\partial t}
\end{aligned}$$

Donc:

$$\begin{cases} p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \\ Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \\ K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t} \end{cases} \quad (I.19)$$

3^{ème} Cas : $F = F_3(p, Q, t)$.

On à dans le cas précédent

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}$$

Soit

$$F_2 = \sum_i p_i q_i + F_3 \quad \text{et} \quad F_3 = F_2 - \sum_i P_i Q_i$$

On a

$$\sum p \dot{q} - H = \sum P \dot{Q} - K + \frac{dF_2}{dt}$$

D'où

$$\begin{aligned}
\frac{dF_2}{dt} &= \sum (\dot{p}q + p\dot{q}) + \frac{dF_3}{dt} \\
\sum p \dot{q} - H &= \sum P \dot{Q} - K + \frac{dF_2}{dt} \\
&= \sum (P\dot{Q} + \dot{p}q + p\dot{q}) - K + \frac{dF_3}{dt} \\
&= \sum (P\dot{Q} + \dot{p}q + p\dot{q}) - K + \frac{\partial F_3}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial F_3}{\partial Q} \dot{Q} + \frac{\partial F_3}{\partial t}
\end{aligned}$$

Donc

$$\begin{cases} q_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i} \\ P_i = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_i} \\ K = H + \frac{\partial F_3}{\partial t} \end{cases} \quad (I.20)$$

4^{ème} Cas: $F = F_4(p, P, t)$

$$F_1 = \sum_i p_i q_i - \sum_i P_i Q_i + F_4$$

$$\frac{dF_1}{dt} = \sum (\dot{p}q + p\dot{q}) - \sum (\dot{P}Q + P\dot{Q}) + \frac{dF_4}{dt}$$

$$\frac{dF_4}{dt} = -\sum (\dot{p}q + p\dot{q}) + \sum (\dot{P}Q + P\dot{Q}) + \frac{dF_1}{dt}$$

Et on a dans le 1^{er} cas :

$$\frac{dF_1}{dt} = \sum p_i \dot{q}_i - H - \sum P_i \dot{Q}_i + K$$

Donc

$$\frac{dF_4}{dt} = -\sum \dot{p}_i q_i + \sum \dot{P}_i Q_i - H + K$$

Et on a

$$\frac{dF_4}{dt} = \frac{\partial F_4}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial F_4}{\partial P} \dot{P} + \frac{\partial F_4}{\partial t}$$

On obtient alors:

$$\begin{cases} q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial p_i} \\ Q_i = \frac{\partial F_4}{\partial P_i} \\ K = H + \frac{\partial F_4}{\partial t} \end{cases} \quad (I.21)$$

I.2.3 Formalisme de Hamilton-Jacobi:

Le formalisme de Hamilton-Jacobi en mécanique classique est une méthode qui peut être construite en théorie en mécanique quantique.

I.2.3.1 L'action de Hamilton-Jacobi:

On a la définition de la variation de l'action déjà introduite en (I.4).

$$\delta S = \int_{t_1}^t \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q}(t) \right) dt$$

L'intégrale du deuxième terme par parties nous donne:

$$\delta S = \frac{\partial L}{\partial q} \delta q(t) + \int_{t_1}^t \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right) \delta q(t) dt$$

Dans (I.7) l'intégrale est nulle. On obtient donc une variation de l'action

$$\delta S = \frac{\partial L}{\partial q} \delta q(t) = p \delta q(t)$$

Ou, généralement

$$dS = \sum_{i=1}^N p_i dq_i - H dt \quad (I.22)$$

Les dérivées partielles de l'action par rapport aux coordonnées donnent les moments conjugués

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} \quad (I.23)$$

Si nous considérons l'action comme fonction des coordonnées et du temps.

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i \quad (I.24)$$

I.2.3.2 Fonction principale:

Supposons les variables P_i et Q_i , constants au cours du temps en hamiltonien, alors

$$\frac{\partial K}{\partial P_i} = \dot{Q}_i = 0 \quad (I. 25)$$

$$-\frac{\partial K}{\partial Q_i} = \dot{P}_i = 0 \quad (I. 26)$$

On a la relation entre K et H est:

$$K = H + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (I. 27)$$

Si on prend $K \equiv 0$ il reste:

$$H(q, p, t) + \frac{\partial F}{\partial t} = 0 \quad (I. 28)$$

On choisit le deuxième cas de fonction génératrice F , c'est-à-dire

$$F = F_2(q, P, t) \quad , \quad p = \frac{\partial F_2}{\partial q} \quad \text{et} \quad Q = \frac{\partial F_2}{\partial P}$$

On pose

$$F_2(q, P, t) = S(q, P, t) \quad (I. 29)$$

C'est la fonction principale de Hamilton

Et on a:

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}$$

Alors on obtient la relation importante :

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} \quad (I. 30)$$

I.2.3.3 Equation de Hamilton-Jacobi:

Remplaçons la relation des moments p_i par les dérivées partielles de l'action (I.30) dans la fonction de Hamilton (I.28), on trouve:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}, t\right) = 0$$

Cette équation est une équation aux dérivées partielles non-linéaire, du premier ordre de la même façon que l'équation d'Euler-Lagrange.

I.2.3.4 Solution de l'équation de Hamilton-Jacobi:

Si S est une solution, $S + \alpha$ est également solution de (I.31) avec $n + 1$ variable. Alors, on peut écrire:

$$S = S(q_1, \dots, q_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n, t) \quad (\text{I. 32})$$

On choisit α_i égales aux nouveaux moments P_i

$$P_i = \alpha_i \quad (\text{I. 33})$$

De l'équation (I.19) on a:

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = \text{constant}$$

D'après (I.29):

$$Q_i = \frac{\partial S(q_i, \alpha_i, t)}{\partial \alpha_i} = \beta_i \quad (\text{I. 34})$$

α_i et β_i sont des constantes .

Alors S est une fonction des q_i et du temps puisque P_i sont constants . On peut écrire

La différentielle de S comme:

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial S}{\partial t} \\ &= \sum_i p_i \dot{q}_i - H \end{aligned} \quad (\text{I. 35})$$

Alors on obtient

$$\frac{dS}{dt} = \sum_i p_i \dot{q}_i - H = L \quad (\text{I. 37})$$

Dans le cas de l'hamiltonien qui ne dépend pas explicitement du temps, l'équation de Hamilton-Jacobi est:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}\right) = 0 \quad (\text{I. 38})$$

On sépare les variables:

$$S(q_i, \alpha_i, t) = W(q_i, \alpha_i) + \alpha_1 t \quad (\text{I. 39})$$

$$H\left(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}\right) = \alpha_1 \quad (\text{I. 40})$$

Les constantes d'intégration de (I.32) est l'énergie totale E et obtient dans ce cas:

$$\begin{cases} S(q, P, t) = W(q, P) - Et \\ H\left(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}\right) = E \end{cases} \quad (\text{I. 41})$$

I.3 Importance de l'approche de Hamilton-Jacobi dans la solution des équations dynamiques pour des mouvements périodiques:

La théorie de Hamilton Jacobi est importante dans les mouvements périodiques elle donne des solutions pour les systèmes ondulatoire.

I.3.1 Solution de l'équation dynamique par la méthode de Hamilton-Jacobi:

La définition de l'équation (I.41) de la fonction de Hamilton-Jacobi quand H ne dépend pas explicitement du temps:

$$S(q, P, t) = W(q, P) - Et$$

la vitesse de propagation de ces ondes dans l'intervalle dt .

$$S(q, P, t) = W - Et$$

$$\begin{aligned}
 S(q, P, t + dt) &= W - E(t + dt) = W - Et - Edt \\
 &= W + dW - Et
 \end{aligned} \tag{I. 42}$$

Il vient:

$$dW = |\vec{\nabla}W| dS = E dt \tag{I. 43}$$

Par conséquent la vitesse de propagation:

$$U = \frac{dS}{dt} = \frac{E}{|\vec{\nabla}W|} \tag{I. 44}$$

L'équation de Hamilton Jacobi donnera alors la valeur du gradient de W puisque:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V = E \quad \text{et} \quad p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i} \tag{I. 45}$$

Donnent:

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z} \right)^2 \right] + V = E \tag{I. 46}$$

Soit:

$$(\vec{\nabla}W)^2 = 2m(E - V) = 2mT \tag{I. 47}$$

La vitesse de propagation des ondes mécaniques sera donc:

$$\begin{aligned}
 U &= \frac{E}{|\vec{\nabla}W|} \\
 U^2 &= \frac{E^2}{|\vec{\nabla}W|^2} \\
 U^2 &= \frac{E^2}{2mT} \\
 U &= \frac{E}{\sqrt{2mT}}
 \end{aligned} \tag{I. 48}$$

$p_i = \partial W / \partial q_i$ et par conséquent $\vec{p} = \vec{\nabla}W$ donne la forme suivante à U :

$$U = \frac{E}{p} = \frac{E}{mV} = \frac{E}{\sqrt{2mT}} \quad (I.49)$$

I.3.2 L'équation de Schrödinger:

Pour obtenir l'équation de Schrödinger prenons la formule de l'onde plane de De Broglie:

$$\psi(\vec{r}, t) = Ae^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} \quad (I.50)$$

Et on utilise les définitions suivantes de l'énergie et le vecteur d'onde:

$$E = \hbar\omega$$

Et

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

On remplace ces relations dans l'équation de la fonction d'onde (I.50) on obtient:

$$\psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{-i(Et - \vec{p}\vec{r})}{\hbar}} \quad (I.51)$$

Où

$$\vec{p}\vec{r} = p_x x + p_y y + p_z z$$

On dérive la relation (I.51) par rapport à \vec{r} , première fois et puis deuxième fois, on obtient:

$$\frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} = \left(\frac{i\vec{p}}{\hbar}\right) Ae^{\frac{-i(Et - \vec{p}\vec{r})}{\hbar}} = \left(\frac{i\vec{p}}{\hbar}\right) \psi(\vec{r}, t)$$

Où

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}} = \frac{\partial}{\partial r} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial r} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial r} \vec{k} = \vec{\nabla}$$

$$\frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}^2} = -\frac{p^2}{\hbar} Ae^{\frac{-i(Et - \vec{p}\vec{r})}{\hbar}} = -\frac{p^2}{\hbar} \psi(\vec{r}, t)$$

Et

$$\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \vec{\nabla}^2 = \Delta$$

$$p^2 \psi(\vec{r}, t) = -\hbar^2 \Delta \psi(\vec{r}, t)$$

$$p^2 = -\hbar^2 \Delta \quad (I.52)$$

Dérive la relation (I. 50) par rapport au temps, on obtient:

$$\frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(\frac{-iE}{\hbar}\right) A e^{\frac{-i(Et - \vec{p}\vec{r})}{\hbar}} = \left(\frac{iE}{\hbar}\right) \psi(\vec{r}, t)$$

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

On a l'énergie totale du système quantique est donné par la relation:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r})$$

Remplace les expressions de E et p^2 dans cette relation et multiplie par $\psi(\vec{r}, t)$, on trouve:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}^2} + U(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r})\right) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \quad (I. 53)$$

Où

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r})$$

Alors

$$H\psi(\vec{r}, t) = E\psi(\vec{r}, t) \quad (I. 54)$$

Cette relation est l'équation de Schrödinger [4,5].

I.4 Formalisme de Hamilton-Jacobi en mécanique quantique:

I.4.1 Équation de Hamilton Jacobi et la Fonction Caractéristique:

L'équation Quantique de Hamilton Jacobi pour la fonction caractéristique est écrite comme :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2 W(x, E)}{\partial x^2} + \left[\frac{\partial W(x, E)}{\partial x} \right]^2 = 2m(E - V(x)) \quad (I.58)$$

dans ce qui suit nous allons démontrer la relation entre l'équation de Schrödinger $\psi(x, E)$ et $W(x, E)$

Nous avons

$$\psi(x, E) \equiv e^{[iW(x, E)]/\hbar} \quad (I.59)$$

où $\psi(x, E)$ est la fonction d'onde indépendante du temps qui s'appelle Eikonal [6].

Pour monter l'équation (I.58), Substitution (I.59) dans l'équation de Schrödinger, avec

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$H\psi = E\psi$$

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V(x) \right] \psi = E\psi$$

$$p^2\psi = 2m(E - V(x))\psi$$

On obtient

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{[iW(x, E)]/\hbar} = 2m(E - V(x)) e^{[iW(x, E)]/\hbar}$$

$$-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} e^{[iW(x, E)]/\hbar} \right) = 2m(E - V(x)) e^{[iW(x, E)]/\hbar}$$

$$-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{i}{\hbar} W(x, E) e^{[iW(x, E)]/\hbar} \right) = 2m(E - V(x)) e^{[iW(x, E)]/\hbar}$$

$$-\hbar^2 \left(\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 W(x, E)}{\partial x^2} - \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{\partial W(x, E)}{\partial x} \right]^2 \right) e^{[iW(x, E)]/\hbar} = 2m(E - V(x)) e^{[iW(x, E)]/\hbar}$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2 W(x, E)}{\partial x^2} + \left[\frac{\partial W(x, E)}{\partial x} \right]^2 = 2m(E - V(x))$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + p(x, E)^2 = 2m(E - V(x))$$

$$\equiv p_c^2(x, E) \tag{I. 60}$$

Où $W(x, E)$ est la fonction caractéristique quantique d'où

$$p(x, E) = \frac{\partial W(x, E)}{\partial x} \tag{I. 61}$$

C'est la fonction du moment quantique, et $p_c(x, E)$ est fonction de moment classique [8].

Nous allons employer cette étude dans le chapitre suivant dans le but de calculer le spectre d'un oscillateur harmonique.

Chapitre II :

Solution de l'équation de Schrödinger par la méthode de Hamilton-Jacobi

II.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous étudions l'oscillateur harmonique à une dimension dans les cas classique, analytique et quantique, on applique la théorie de Hamilton-Jacobi pour résoudre l'équation d'un système constitué d'un oscillateur harmonique simple (une dimension), puis on applique cette théorie sur l'oscillateur de Morse.

II.2 Etude d'un hamiltonien hermétique d'un oscillateur harmonique ordinaire :

L'oscillateur harmonique en une dimension est un problème plus simple et peut être aussi le plus important de la mécanique quantique.

II.2.1 Etude classique de l'oscillateur harmonique:

En mécanique classique, l'oscillateur harmonique est une particule de masse m se déplace le long d'un axe ox et soumise à une force de rappel : $\vec{F}_x = -k\vec{x}$, où x représente l'écart par rapport à la position d'équilibre $x = 0$.

Un exemple d'un mouvement oscillatoire d'une masse reliée à un ressort est indiqué dans la figure (II.1).

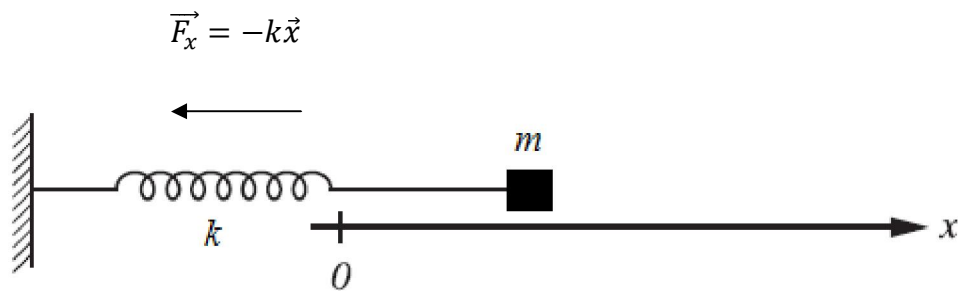


Figure (II.1) :oscillateur harmonique simple.

Le mouvement de la particule est décrit par l'équation de la dynamique:

$$\ddot{x} + w^2x = 0 \quad (\text{II. 1})$$

$$w = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Où : w la fréquence (pulsation).

k est une constante réelle et positive, le mouvement de la particule est une oscillation de fréquence ω .

II.2.1.1 Cas classique :

L'énergie totale du système est:

$$E_{tot} = E_c + E_p$$

L'énergie cinétique: $E_c = \frac{1}{2}mv^2$ (II.2)

L'énergie potentielle: $E_p = \frac{1}{2}kx^2$ (II.3)

Où : v la vitesse

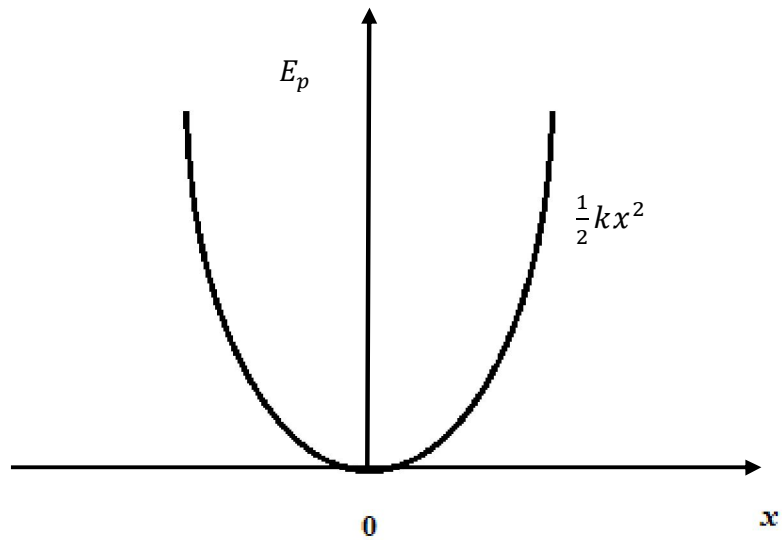


Figure (II.2): Potentiel d'un oscillateur harmonique à une dimension.

II.2.2 Etude Analytique de l'oscillateur harmonique :

II.2.2.1 Lagrangien :

L'oscillateur harmonique en une dimension est décrit par une coordonnée q et son lagrangien est:

$$\begin{aligned} L &= T - U \\ &= \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \end{aligned} \quad (\text{II.4})$$

Où : T énergie cinétique

U énergie potentiel

m est la masse

II.2.2.1.a Les équations de mouvement :

Pour obtenir l'équation de mouvement il faut utiliser l'équation de Euler-Lagrange:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) &= 0 \\ \frac{\partial L}{\partial q} &= -m\omega^2 q \\ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} &= m\dot{q} \\ \frac{d}{dt} (m\dot{q}) + m\omega^2 q &= 0 \\ m\ddot{q} + m\omega^2 q &= 0 \\ \ddot{q} + \omega^2 q &= 0 \end{aligned} \quad (\text{II.5})$$

C'est l'équation de mouvement obtenue par le formalisme de Lagrange.

II.2.2.2 L'hamiltonien :

On à la fonction de Hamilton s'écrit:

$$H = T + U$$

Et la forme de l'hamiltonien en fonction de L :

$$H = p\dot{q} - L$$

L'impulsion correspondante est:

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}$$

Donc

$$\begin{aligned} H &= p\dot{q} - L \\ &= m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \\ &= \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \quad , \quad (\dot{q}^2 = \frac{p^2}{m^2}) \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \end{aligned} \tag{II. 6}$$

II.2.2.2.a Les équations de mouvement :

On à déjà définie ces équations de mouvement dans le chapitre I, donc

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega^2q \\ \ddot{q} + \omega^2q &= 0 \end{aligned} \tag{II. 7}$$

Cette équation de mouvement est une équation différentielle de deuxième ordre [7.8].

II.2.3 Etude quantique de l'oscillateur harmonique :

Dans cette partie, nous allons faire une étude quantique de l'oscillateur harmonique. L'opérateur hamiltonien en mécanique quantique associé à l'énergie mécanique de la particule s'écrit:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (\text{II. 11})$$

L'étude quantique de l'oscillateur harmonique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres de H :

$$H|\varphi_v\rangle = E|\varphi_v\rangle \quad (\text{II. 12})$$

II.2.3.1 les valeurs propres de H (énergies) :

II.2.3.1.a les opérateurs de création et d'annihilation :

Introduisons les opérateurs de création a^+ et d'annihilation a définis en mécanique quantique par:

$$\begin{cases} a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P \\ a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P \end{cases} \quad (\text{II. 13})$$

On définit l'opérateur « nombre de quanta » par

$$N = a^+ a \quad (\text{II. 14})$$

L'opérateur a permet de passer d'un niveau d'énergie E_n à un niveau d'énergie $E_{n-1}=E_n - \hbar\omega$ par annihilation d'un quantum d'énergie $\hbar\omega$. L'opérateur a est appelé opérateur annihilation.

L'opérateur a^+ permet de passer d'un niveau d'énergie E_n à un niveau d'énergie $E_{n+1}=E_n + \hbar\omega$ par création d'un quantum d'énergie $\hbar\omega$. L'opérateur a^+ est appelé opérateur création.

Sachant que:

- 1- N est hermétique.
- 2- $[a, a^+] = 1$ et $H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})$

Démonstrations:

$$1 - N^+ = (a^+ a)^+ = a^+ a = N$$

$$\begin{aligned}
 2 - N = a^+ a &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P \right) \\
 N &= \frac{m\omega}{2\hbar} X^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega} P^2 + i \frac{1}{\hbar} \underbrace{(XP - PX)}_{i\hbar} \\
 &= \frac{m\omega}{2\hbar} X^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega} P^2 - \frac{1}{2} \\
 &= \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 \right) - \frac{1}{2} \\
 &= \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2}
 \end{aligned}$$

De même

$$\begin{aligned}
 aa^+ &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P \right) \\
 &= \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2}
 \end{aligned}$$

D'où

$$[a, a^+] = aa^+ - a^+ a = 1$$

Donc, l'expression de l'hamiltonien quantique de l'oscillateur harmonique peut être donné par:

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II. 15})$$

Les vecteurs propres de H sont les mêmes que ceux de l'opérateur hermétique N , où N les valeurs propres qui représentent les valeurs possibles de l'énergie d'un oscillateur harmonique.

II.2.3.1.b les valeurs propres de N :

Le problème de la recherche des valeurs stationnaires de l'énergie totale d'un oscillateur harmonique à une dimension en mécanique quantique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres:

$$N|\varphi_v\rangle = v|\varphi_v\rangle \quad (\text{II. 16})$$

Propriétés:

- 1- Les valeurs de v sont réelles et positives.
- 2- $a|\varphi_v\rangle = 0$
- 3- $Na|\varphi_v\rangle = (v - 1)a|\varphi_v\rangle$ et $Na^+|\varphi_v\rangle = (v + 1)a|\varphi_v\rangle$

Démonstrations:

- 1- On a $\langle\varphi_v|a^+a|\varphi_v\rangle = v\langle\varphi_v|\varphi_v\rangle$
 or $\langle\varphi_v|\varphi_v\rangle \geq 0$ et $\langle\varphi_v|a^+a|\varphi_v\rangle = \|a|\varphi_v\rangle\|^2 \geq 0$
 d'où $v \geq 0$
- 2- $\|a|\varphi_0\rangle\|^2 = \langle\varphi_0|a^+a|\varphi_0\rangle = 0\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 0$
 d'où $a|\varphi_0\rangle = 0$.
- 3- $Na|\varphi_v\rangle = a^+aa|\varphi_v\rangle = (a^+a - 1)a|\varphi_v\rangle = (aN - a)|\varphi_v\rangle$
 $= (v - 1)a|\varphi_v\rangle$

Et

$$Na^+|\varphi_v\rangle = a^+aa^+|\varphi_v\rangle = a^+(N + 1)|\varphi_v\rangle = (v + 1)a^+|\varphi_v\rangle$$

v est un nombre entier naturel, donc on remplace v par n .

Donc on peut dire que les valeurs propres de l'opérateur hamiltonien sont quantifiées [9]:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II. 17})$$

II.3 Equation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique :

Dans le cas d'un oscillateur linéaire harmonique (une dimension), la fonction hamiltonien classique d'une particule avec la masse m oscillante avec la fréquence w prend la forme:

$$\begin{aligned} H &= T + V \\ &= \frac{P^2}{2m} + \frac{m}{2}w^2x^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2}w^2x^2 \end{aligned}$$

L'équation de Schrödinger pour le problème de l'oscillateur harmonique prend la forme:

$$H\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{m}{2}w^2x^2\psi = E\psi \quad (\text{II. 23})$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{mw^2x^2}{2} \right) \psi = 0 \quad (\text{II. 24})$$

II.4 Solution de l'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique en mécanique quantique :

L'oscillateur harmonique est d'une grande importance en théorie quantique car il s'impose dans tous les problèmes mettant en jeu des oscillations quantifiées telles que les vibrations. De plus c'est aussi un système simple dont on sait résoudre parfaitement l'équation de Schrödinger.

Pour simplifier, on introduit la notation $q = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}}x$, et on pose

$$\varphi(q) = \psi(x) \quad (\text{II. 25})$$

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\varphi}{dq} \frac{dq}{dx} = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}} \frac{d\varphi}{dq}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{mw}{\hbar} \frac{d^2\varphi}{dq^2}$$

L'équation différentielle s'écrit

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{mw}{\hbar} \frac{d^2\varphi}{dq^2} + \frac{1}{2}mw^2q^2 \frac{\hbar}{mw} \varphi(q) &= E\varphi(q) \\ -\frac{\hbar w}{2} \frac{d^2\varphi}{dq^2} + \frac{1}{2}w\hbar q^2 \varphi(q) &= E\varphi(q) \\ -\frac{d^2\varphi}{dq^2} + \frac{1}{2}q^2 \varphi(q) &= \frac{2E}{\hbar w} \varphi(q) \end{aligned} \quad (\text{II. 26})$$

Soit

$$\frac{d^2\varphi}{dq^2} + (\lambda - q^2)\varphi(q) = 0$$

On a posé $\lambda = \frac{2E}{\hbar w}$.

Lorsque $q \rightarrow \infty$, l'équation différentielle est approximativement donnée par :

$$\begin{aligned} \frac{d^2\varphi}{dq^2} &\simeq q^2\varphi(q) \\ \varphi(q) &\propto e^{\pm\frac{1}{2}q^2} \end{aligned} \quad (\text{II. 27})$$

Schrödinger émet l'hypothèse que la solution doit être bornée et que seul le comportement asymptotique $e^{-\frac{1}{2}q^2}$ est acceptable.

Cherchons donc la solution sous la forme

$$\varphi(q) = H(q)e^{-\frac{1}{2}q^2}$$

$$\frac{d\varphi}{dq} = \frac{dH}{dq} e^{-\frac{1}{2}q^2} + H(q)(-q)e^{-\frac{1}{2}q^2} \quad (\text{II. 28})$$

$$\frac{d^2\varphi}{dq^2} = \frac{d^2H}{dq^2} e^{-\frac{1}{2}q^2} + 2 \frac{dH}{dq} (-q)e^{-\frac{1}{2}q^2} - H(q)e^{-\frac{1}{2}q^2} + q^2 H(q)e^{-\frac{1}{2}q^2}$$

L'équation différentielle en H s'écrit donc:

$$\frac{d^2H}{dq^2} - 2q \frac{dH}{dq} + (\lambda - 1)H = 0 \quad (\text{II. 29})$$

Cherchons la solution sous la forme d'un développement en série:

$$H(q) = \sum_{j=0}^{+\infty} a_j q^j \quad (\text{II. 30})$$

Il vient:

$$\frac{dH}{dq} = \sum_{j=1}^{+\infty} a_j j q^{j-1} = \sum_{j=0}^{+\infty} a_{j+1} (j+1) q^j$$

$$\frac{d^2H}{dq^2} = \sum_{j=1}^{+\infty} a_{j+1} (j+1) j q^{j-1} = \sum_{j=0}^{+\infty} a_{j+2} (j+2)(j+1) q^j$$

$$q \frac{dH}{dq} = \sum_{j=1}^{+\infty} a_j j q^j = \sum_{j=0}^{+\infty} a_j j q^j \quad (\text{II. 31})$$

$$\sum_{j=0}^{+\infty} [a_{j+2} (j+2)(j+1) - 2a_j j + (\lambda - 1)a_j] q^j = 0$$

$$a_{j+2} = a_j \frac{2j + (1 - \lambda)}{(j+2)(j+1)}$$

Supposons $2j + 1 - \lambda \neq 0 \quad \forall j$, et étudions le comportement asymptotique des solutions.

Comme $V(q) \propto q^2$ est pair, on peut chercher des solutions paires ou impaires.

Solutions paires :

$$H(q) = \sum_{j=0}^{+\infty} a_j q^j$$

Mais

$$a_{2j} = a_{2j-2} \frac{4j - 3 - \lambda}{2j(2j - 1)} \propto \frac{a_{2j}}{j} \quad \text{pour } j \text{ grand}$$

$$\sum_{j=0}^{+\infty} a_j q^j \simeq e^{q^2}$$

$$\varphi(q) \propto e^{\frac{1}{2}q^2}$$

D'après l'hypothèse selon laquelle les solutions doivent être bornées, cette solution doit être rejetée.

Solutions impaires :

$$H(q) = \sum_{j=0}^{+\infty} a_{2j+1} q^{2j+1}$$

$$a_{2j+1} = a_{2(j-1)+1} \frac{4j - 2 + 1 - \lambda}{(j + 2)(j + 1)} \propto \frac{a_{2j-1}}{j}$$

$$\sum_{j=0}^{+\infty} a_{2j+1} q^{2j+1} \simeq q e^{q^2}$$

Cette solution doit aussi être rejetée.

Il doit exister un entier n tel que $2n + 1 - \lambda = 0$, soit

$$\lambda = 2n + 1 \tag{II. 32}$$

Dans ce cas, la relation de récurrence sur les coefficients s'écrit:

$$a_{j+2} = a_j \frac{2(j - n)}{(j + 1)(j + 2)} \tag{II. 33}$$

Solutions paires : n pair, $a_j = 0$ si j impair et $a_{n+2} = a_{n+4} = \dots = 0$

Solutions impaires : n impair, $a_j = 0$ si j pair et $a_{n+2} = a_{n+4} = \dots = 0$

Les solutions $H(q)$ sont donc des polynômes.

Les énergies propres sont fixées par la condition $\lambda = 2n + 1$, $n = 0, 1, \dots$

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

Les fonctions propres associées sont des fonctions du type $H(q)e^{-\frac{1}{2}q^2}$ avec

$$H_n(q) = \begin{cases} a_0 + a_2 q^2 + \dots + a_n q^n & \text{si } n \text{ pair} \\ a_1 q + a_3 q^3 + \dots + a_n q^n & \text{si } n \text{ impair} \end{cases} \quad (\text{II. 34})$$

Avec
$$a_{j+2} = a_j \frac{2(j-n)}{(j+1)(j+2)}$$

Les polynômes $H_n(q)$ sont appelés *polynômes de Hermite* (voir annexe A) [9].

II.5 Etude de spectre de l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique par la méthode de Hamilton-Jacobi :

II.5.1 La solution par la méthode de Hamilton-Jacobi :

Comme nous avons démontré dans le chapitre I Le formalisme quantique de Hamilton-Jacobi nous donne l'équation quantique de Hamilton-Jacobi suivante:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2 W(x, E)}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial W(x, E)}{\partial x} \right)^2 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + p^2(x, E) = 2m(E - V(x))$$

$$\equiv p_c^2(x, E) \quad (\text{II. 44})$$

$W(x, E)$ est la fonction quantique caractéristique avec

$$p(x, E) = \frac{\partial W(x, E)}{\partial x}$$

La fonction du moment quantique.

p_c est défini pour être la fonction du moment classique, pour l'équation (II.44) on obtient

$$p(x, E) \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} p_c(x, E) \quad (\text{II. 45})$$

C'est-à-dire en revient au cas classique, c'est l'équivalent du principe de correspondance.

La fonction caractéristique de $W(x, E)$ est liée aux vecteurs propres d'énergie.

$$\psi(x, E) = e^{\frac{i}{\hbar}S(x,P,t)} \quad (\text{II. 46})$$

On a déjà expliqué dans le chapitre I que:

$$S(x, P, t) = W(q, P) - Et$$

Donc on peut écrire

$$\psi(x, E) = e^{\frac{iW(x,E)}{\hbar}} \quad (\text{II. 47})$$

Ainsi on obtient,

$$p(x, E) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi(x, E)}{\partial x} \quad (\text{II. 48})$$

On démontre cette relation comme suite:

On à :

$$\begin{aligned} \psi(x, E) &= e^{\frac{i}{\hbar}W(x,E)} \\ \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, E) &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x} W(x, E) e^{\frac{i}{\hbar}W(x,E)} \\ &= \frac{i}{\hbar} p(x, E) \psi(x, E) \end{aligned}$$

Donc

$$p(x, E) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi(x, E)}{\partial x}$$

II.5.1.1 L'action quantique de Hamilton Jacobi $J(E)$:

L'analogie quantique de la variable de l'action classique S de Hamilton-Jacobi (S définie dans le chapitre précédent) est donné par :

$$J(E) = (1/2\pi) \oint_C p(x, E) dx \tag{II. 49}$$

On remarque ici que la nouvelle définition de l'action prend la forme d'une intégrale dans un plan complexe, C est un contour dans le sens antihoraire dans le plan complexe x , qui enferme les lignes entre les points de retournement classiques, ces derniers sont des valeurs réels de x pour lesquelles $p_c^2(x, E)$ est nul.

La fonction d'onde est connue pour avoir des nœuds entre les points de retournement classiques, ces nœuds correspondent aux pôles de la fonction du moment quantique, dans ce qui suit nous allons expliquer en détail la méthode appliqué.

II.5.1.2 Application du théorème des résidus :

A proximité d'un zéro de la fonction d'onde, situé à x_0 , nous écrivons,

$$\psi = (x - x_0)\varphi(x) \tag{II. 50}$$

On remplace cette équation dans la relation (II.48).

$$\begin{aligned} p(x, E) &= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi(x, E)}{\partial x} \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{(x - x_0)\varphi(x)} \frac{\partial [(x - x_0)\varphi(x)]}{\partial x} \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{(x - x_0)\varphi(x)} \left[\varphi(x) + (x - x_0) \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \right] \end{aligned}$$

Pour simplifier on néglige le deuxième terme, alors

$$p(x, E) \approx \frac{\hbar}{i} \frac{1}{(x - x_0)} + \dots \tag{II. 51}$$

$p(x, E)$ possède un pôle x_0 de premier ordre, alors le résidus de $p(x, E)$ peut être calculer en appliquant la définition pour un pôle simple:

$$\begin{aligned}
 \text{Res } p(x, E) &= \lim_{x \rightarrow x_0} (x - x_0) p(x, E) \\
 &= \frac{\hbar}{i} \lim_{x \rightarrow x_0} (x - x_0) \frac{1}{(x - x_0)} \\
 &= -i\hbar
 \end{aligned} \tag{II. 52}$$

Revenant au variable de l'action quantique et substituons

$$J(E) = (1/2\pi) \oint_C p(x, E) dx$$

Par définition

$$\begin{aligned}
 \oint_C p(x, E) dx &= 2\pi i \text{Res } p(x, E) \\
 &= 2\pi i(-i\hbar) \\
 &= 2\pi\hbar
 \end{aligned} \tag{II. 53}$$

Donc

$$J(E) = \hbar$$

II.5.1.3 Action quantique de Hamilton-Jacobi et valeurs propres des énergies :

On peut vérifier l'utilité du théorème des résidu, en prenant la valeur de $p(x, E)$ dans (II. 51) et substituons dans l'équation de Hamilton-Jacobi (II. 44), la contribution des deux termes s'annihile seulement si les pôles de la fonction du moment quantique sont du premier ordre avec un résidu $-i\hbar$.

$$\begin{aligned}
 \frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + p^2(x, E) &= 2m(E - V(x)) \\
 \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{1}{(x - x_0)} \right) + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{1}{(x - x_0)} \right)^2 &= 2m(E - V(x)) \\
 0 &= 2m(E - V(x))
 \end{aligned}$$

Ces pôles du premier ordre sont à l'origine de la mécanique quantique, leurs positions

dépendent de la valeur de l'énergie, ils représentent alors la solution des vecteur propres de l'énergie, leurs effet est parfaitement similaire aux fonctions d'ondes quand elles changent leurs positions en fonction de l'énergie.

Alors pour un niveau d'énergie donné le nombre quantique n correspond aux nombres des nœuds de la fonction d'onde, il représente aussi le nombre des pôles mouvantes de $p(x, E)$ à l'intérieur du contour C dans l'équation (II. 49) dont le résidu de chaque pôle est $-i\hbar$.

Alors la condition de la quantification implique

$$J(E) = n\hbar \quad (\text{II. 54})$$

II.5.2 Application à l'oscillateur harmonique :

II.5.2.1 Les valeurs propres :

L'équation quantique de Hamilton-Jacobi pour le problème de l'oscillateur harmonique unidimensionnel avec le potentiel $V(x) = mw^2 x^2/2$ est :

$$p^2 + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} = 2m \left(E - \frac{mw^2 x^2}{2} \right) \equiv p_c^2 \quad (\text{II. 55})$$

les points de retournement, déterminés à partir de $p_c^2(x, E) = 0$, sont $-x_1 = x_2 = +\sqrt{2E/(mw^2)}$

Comme nous avons vu dans la section précédente la condition de quantification est donné par

$$J(E) = (1/2\pi) \oint_C p(x, E) dx = n\hbar$$

Ici, C est le contour encerclant les pôles qui se déplacent entre les deux points de retournement x_1 et x_2 , on remarque ici qu' il ya un seul pôle fixe de $p(x, E)$ à $x \rightarrow \infty$.

Pour calculer $J(E)$ on considère une intégrale I_{Γ_R} le long d'un contour circulaire Γ_R ayant le rayon R et orientée dans le sens antihoraire. La fonction du moment quantique n'a pas des points singuliers entre Γ_R et C . Ainsi, dans ce cas là, $J(E)$ coïncide avec I_{Γ_R} :

$$I_{\Gamma_R} = J(E) \quad (\text{II. 56})$$

Utilisant le changement de variable $x = \frac{1}{y}$ Pour calculer l'intégrale Γ_R

$$x = \frac{1}{y} \Rightarrow dx = -\frac{1}{y^2} dy$$

Donc

$$I_{\Gamma_R} = (1/2\pi) \oint_{\Gamma_R} p(x, E) dx \quad (\text{II. 57})$$

$$= (1/2\pi) \oint_{\gamma_0} dy \tilde{p}(y, E) \frac{1}{y^2} \quad (\text{II. 58})$$

Ici, $\tilde{p}(y, E) = p\left(\frac{1}{y}, E\right)$ et le contour anti-horaire γ_0 enferme un seul point singulier dans le-plan y , c'est à dire le pôle à $y = 0$.

Dans (II.58) il n'y a pas de signe négatif avant l'intégrale à cause du changement de variable et la direction du contour anti-horaire .

L'équation Hamilton-Jacobi quantique en fonction de la variable y s'écrit comme :

$$\tilde{p}^2(y, E) + i\hbar y^2 \frac{\partial \tilde{p}(y, E)}{\partial y} = 2m \left(E - \frac{mw^2}{2y^2} \right) = \tilde{p}_c^2 \quad (\text{II. 59})$$

II.5.2.2 Développement en série de Laurent :

Pour calculer la contribution du pôle à $y = 0$, $\tilde{p}(y, E)$ est développé en série de Laurent comme

$$\tilde{p}(y, E) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n + \sum_{q=1}^k \frac{b_q}{y^q} \quad (\text{II. 60})$$

En remplaçant $\tilde{p}(y, E)$ dans l'équation (II.59) on obtient:

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n + \sum_{q=1}^k \frac{b_q}{y^q} \right)^2 + i\hbar y^2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n + \sum_{q=1}^k \frac{b_q}{y^q} \right) = 2m \left(E - \frac{mw^2}{2y^2} \right)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (a_n)^2 (y^n)^2 + 2 \sum_{n=0}^{\infty} (a_n y^n) \sum_{q=1}^k \left(\frac{b_q}{y^q} \right) + \sum_{q=1}^k \left(\frac{b_q}{y^q} \right)^2 +$$

$$i\hbar y^2 \left[\sum_{n=0}^{\infty} a_n n y^{n-1} + \sum_{q=1}^k b_q \left(\frac{-q y^{q-1}}{y^{2q}} \right) \right] = 2m \left(E - \frac{mw^2}{2y^2} \right)$$

En comparant les côtés gauche et droit, il est constaté que, $b_q = 0$ pour $q > 1$

$$(a_0^2 y^0 + a_1^2 y^2 + \dots) + 2(a_0 y^0 + a_1 y^1 + \dots) \left(\frac{b_1}{y} + \dots \right) + \left(\frac{b_1^2}{y^2} + \dots \right) +$$

$$i\hbar y^2 [a_1 y^0 + \dots] - i\hbar y^2 \left[\frac{b_1}{y^2} y^0 + \dots \right] = 2m \left(E - \frac{m\omega^2}{2y^2} \right)$$

En assimilant les coefficients des différentes puissances de y , on trouve

$$b_1^2 = -m^2 \omega^2 \tag{II. 61}$$

$$2a_0 b_1 = 0 \tag{II. 62}$$

$$-i\hbar b_1 + 2a_1 b_1 + a_0^2 = 2mE \tag{II. 63}$$

Les équations (II.61), (II.62) et (II. 63) on donne:

$$\begin{cases} b_1 = \pm i m \omega \\ a_0 = 0 \\ a_1 = \frac{2E - \hbar \omega}{2i\omega} \end{cases}$$

Cette ambiguïté dans le signe pour b_1 peut être enlevé, si nous appliquons la condition limite donnée par l'équation (II. 45). Dans la convention suivie ici, la fonction dynamique classique est défini tel que $p_c(x, E) = +i|p_c|$ sur l'axe réel positif dans la limite $y \rightarrow 0$, $x \rightarrow \infty$, $p_c \approx i m \omega / y$ et donc l'équation (2.60). Il s'ensuit que $b_1 = i m \omega$.

Alors

$$\begin{aligned} \tilde{p}(y, E) &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n + \sum_{q=1}^k \frac{b_q}{y^q} \\ &= a_1 y + \frac{b_1}{y} \\ &= \frac{2E - \hbar \omega}{2i\omega} y + \frac{i m \omega}{y} \end{aligned}$$

II.5.2.3 L'action Quantique :

On a déjà expliqué comment calculer l'action quantique de Hamilton-Jacobi dans une section précédente dans le but de calculer les valeurs propres, ici on refait la même chose pour l'oscillateur harmonique, en partant de la définition suivante :

$$J(E) = I_{r_R} = (1/2\pi) \oint_{\gamma_0} dy \tilde{p}(y, E) \frac{1}{y^2}$$

Pour calculer cette intégrale on utilise le théorème des résidus dont la définition (voir annexe B).

$$Res(f(Z)) = \frac{1}{(n-1)!} \lim_{Z \rightarrow Z_0} \left[\frac{d^{n-1} f(Z)}{dZ^{n-1}} \right] \quad (\text{II. 64})$$

Avec

$$\oint_C f(Z) dZ = 2\pi i \sum_{k=1}^n Res(f(Z_k)) \quad (\text{II. 65})$$

On employant le développement de Laurent (II.60) et la simplification des termes dans les équations (II.61), (II.62) et (II.63) on trouve que :

$$\tilde{p}(y, E) = a_1 y + \frac{b_1}{y}$$

Alors

$$\begin{aligned} \oint_{\gamma_0} dy \tilde{p}(y, E) \frac{1}{y^2} &= 2\pi i \sum_{k=1}^n Res(\tilde{p}(y, E) \frac{1}{y^2}) \\ &= 2\pi i \left(Res\left(\frac{a_1}{y}\right) + Res\left(\frac{b_1}{y^3}\right) \right) \end{aligned}$$

On pose

$$f_1(y) = \frac{a_1}{y}$$

$$f_2(y) = \frac{b_1}{y^3}$$

On constate qu'il y a deux pôles pour cette intégral, pour le premier terme le pôle est 0 et de premier ordre, pour le deuxième terme, le pôle est ∞ et de troisième ordre

$$Res(f(z)) = \lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0) f(z)$$

Donc

$$\begin{aligned}\mathcal{R}es(f_1(y)) &= \lim_{y \rightarrow y_0} (y - y_0) f_1(y) \\ &= \lim_{y \rightarrow 0} y \frac{a_1}{y} \\ &= a_1\end{aligned}$$

Et on a

$$\mathcal{R}es(f(Z)) = \frac{1}{(n-1)!} \lim_{Z \rightarrow Z_0} \left[\frac{d^{n-1} f(Z)}{dZ^{n-1}} \right]$$

Alors

$$\begin{aligned}\mathcal{R}es(f_2(y)) &= \frac{1}{(n-1)!} \lim_{y \rightarrow \infty} \left[\frac{d^{n-1}}{dy^{n-1}} f_2(y) \right] \\ &= \frac{1}{2!} \lim_{y \rightarrow \infty} \left[\frac{d^2}{dy^2} \left(\frac{b_1}{y^3} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2!} \lim_{y \rightarrow \infty} \left[\frac{d}{dy} \left(\frac{-3b_1 y^2}{y^6} \right) \right] \\ &= \frac{-3b_1}{2} \lim_{y \rightarrow \infty} \left[\frac{d}{dy} \left(\frac{1}{y^4} \right) \right] \\ &= 6b_1 \lim_{y \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{y^5} \right) \\ &= 0\end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned}\oint_{\gamma_0} dy \tilde{p}(y, E) \frac{1}{y^2} &= 2\pi i (\mathcal{R}es(f_1(y)) + \mathcal{R}es(f_2(y))) \\ &= 2\pi i (a_1 + 0) \\ &= 2\pi i a_1\end{aligned}$$

Alors

$$\begin{aligned}
 J(E) = I_{\Gamma_R} &= (1/2\pi) \oint_{\gamma_0} dy \tilde{p}(y, E) \frac{1}{y^2} \\
 &= \frac{1}{2\pi} 2\pi i a_1 \\
 &= i a_1 \\
 &= \frac{2E - \hbar\omega}{2\omega} \tag{II. 66}
 \end{aligned}$$

Ainsi, la condition de quantification

$$\begin{aligned}
 J(E) &= \frac{2E - \hbar\omega}{2\omega} = n\hbar \\
 2E - \hbar\omega &= 2\omega n\hbar \\
 E &= \frac{2\omega n\hbar + \hbar\omega}{2} \\
 E &= \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \tag{II. 67}
 \end{aligned}$$

Ce qui est représenté l'expression bien connue de l'énergie d'oscillateur harmonique[10.11].

II.5.2.4 Les vecteurs propres :

On a l'équation de Hamilton-Jacobi pour l'oscillateur harmonique (on considère $\hbar = 1 = 2m$),

$$p^2(x, E) - ip'(x, E) - \left(E - \frac{1}{4}\omega^2 x^2\right) = 0 \tag{II. 68}$$

Nous avons démontré dans la section précédente la fonction du moment quantique $p(x, E)$ a n pôles qui correspond aux zéros de la fonction d'onde, avec des résidus à chacun de ces pôles est $-i$, (car $\hbar = 1$).

A partir de l'équation (II. 68) Pour x grand on trouve

$$p(x, E) \approx \pm \frac{1}{2} i\omega x$$

Et nous écrivons

$$p(x, E) \approx \pm \frac{1}{2} iwx + Q(x)$$

Où $Q(x)$ doit être déterminé.

Le signe de $p(x, E)$ est déterminé par l'état le carré de l'intégral de la fonction d'onde.

Où La fonction d'onde est donnée par

$$\psi(x) = \exp\left(i \int p(x, E) dx\right)$$

Quand la valeur ci-dessus de $p(x, E)$ est substitué dans l'équation de la fonction d'onde, la fonction d'onde est lié à x grand on choisit alors le signe positif de $\frac{1}{2} iwx$.

On utilise la définition suivante de la fonction du moment quantique $p(x, E)$:

$$p(x, E) = \sum_{k=1}^n \frac{-i}{x - x_k} + \frac{1}{2} iwx + Q(x)$$

Où x_1, x_2, \dots, x_n , représentent les emplacement des n pôles sur l'axe x , le $Q(x)$ est analytique et limité à l'infini. Par conséquent et d'après le théorème de Liouville $Q(x)$ ce doit être une constante. $Q(x) = c$ une constante, alors l'équation ci-dessus devient

$$p(x, E) = \sum_{k=1}^n \frac{-i}{x - x_k} + \frac{1}{2} iwx + c$$

La somme sur tous les pôles

$$\sum_{k=1}^n \frac{-i}{x - x_k} \tag{II. 69}$$

peut être exprimé comme $\frac{P'(x)}{P(x)}$ où $P(x)$ est un polynôme

$$P(x) = \prod_{k=1}^n (x - x_k) \tag{II. 70}$$

L'expression de la fonction du moment quantique peut être exprimé par ,

$$\begin{aligned} p(x, E) &= \sum_{k=1}^n \frac{-i}{x - x_k} + \frac{1}{2} iwx \\ &= -i \frac{P'(x)}{P(x)} + \frac{1}{2} iwx \end{aligned} \tag{II. 71}$$

Substituons cette équation dans (II.68),

$$p^2(x, E) - ip'(x, E) - \left(E - \frac{1}{4}w^2x^2\right) = 0$$

$$\left(-i \frac{P'(x)}{P(x)} + \frac{1}{2}iwx\right)^2 - i \left(-i \frac{P'(x)}{P(x)} + \frac{1}{2}iwx\right)' - \left(E - \frac{1}{4}w^2x^2\right) = 0$$

$$-\frac{(P'(x))^2}{(P(x))^2} - \frac{1}{4}w^2x^2 + wx \frac{P'(x)}{P(x)} - \frac{P''(x)}{P(x)} + \frac{(P'(x))^2}{(P(x))^2} + \frac{1}{2}w - E + \frac{1}{4}w^2x^2$$

$$= 0$$

En utilise la relation (II.67) qui nous donne les valeurs de l'énergie

$$P''(x) - wxP'(x) - \frac{1}{2}wP(x) + \left(n + \frac{1}{2}\right)wP(x) = 0$$

$$P''(x) - wxP'(x) + nwP(x) = 0 \quad (\text{II. 72})$$

Nous effectuons les changements des variables suivants : $\xi = \alpha x$, $\alpha^2 = \frac{w}{2}$, alors l'équation précédant devient ,

$$P''(\xi) - 2\xi P'(\xi) + 2nP(\xi) = 0 \quad (\text{II. 73})$$

L'équation ci-dessus ressemble à l'équation bien connue de Hermite qu' on a déjà étudié dans le calcul des vecteurs propres pour l'oscillateur harmonique (voir l'annexe A). Par comparaison, nous obtenons

$$P(\xi) = H_n(\alpha x) \quad (\text{II. 74})$$

H_n , est le polynôme de Hermite.

La fonction d'onde est exprimée comme ,

$$\psi(x) = \exp \left[i \int p(x, E) dx \right]$$

Introduisons la valeur de $p(x, E)$

$$\psi(x) = \exp \left[i \int \left(-i \frac{P'(x)}{P(x)} + \frac{1}{2}iwx \right) dx \right]$$

$$\begin{aligned}\psi(x) &\equiv \exp \left[i \int \left(-i \frac{H'(\alpha x)}{H(\alpha x)} + \frac{1}{2} i w x \right) dx \right] \\ &= \exp \left(\int \left(\frac{H'(\alpha x)}{H(\alpha x)} \right) dx \right) \exp \left(- \int \left(\frac{1}{2} w x \right) dx \right) \\ &= \exp (\ln H(\alpha x)) \exp \left(- \frac{1}{4} w x^2 \right)\end{aligned}$$

Donc

$$\psi(x) = H(\alpha x) \exp \left(- \frac{1}{4} w x^2 \right) \quad (\text{II. 75})$$

C'est la fonction d'onde désirée pour l'oscillateur harmonique .

II.5.3 L'oscillateur de Morse :

Le potentiel de Morse, nommé d'après le physicien Philip Morse, est un modèle pratique d'énergie potentielle pour une molécule diatomique.

II.5.3.1 Spectre des énergies de l'oscillateur de Morse

L'énergie potentielle de l'oscillateur de Morse est donnée par:

$$V(x) = A^2 + B^2 e^{-2\alpha x} - 2B \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) e^{-\alpha x} \quad (\text{II. 76})$$

Avec le super potentiel:

$$W(x) = A - B e^{-\alpha x} \quad (\text{II. 77})$$

Et $S = \frac{A}{\alpha}$

L'équation de quantum Hamilton-Jacobi est donnée par ($\hbar = 1 = 2m$)

$$\begin{aligned}p^2(x, E) - ip'(x, E) - [E - V(x)] &= 0 \\ p^2(x, E) - ip'(x, E) - \left[E - A^2 - B^2 e^{-2\alpha x} + 2B \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) e^{-\alpha x} \right] &= 0\end{aligned} \quad (\text{II. 78})$$

Nous utilisons un changement de variable :

$$y = \frac{2B}{\alpha} e^{-\alpha x} \quad (\text{II. 78})$$

L'équation quantique Hamilton-Jacobi avec la nouvelle variable est:

$$\tilde{p}^2(y, E) + i\alpha y \tilde{p}'(y, E) - \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] = 0 \quad (\text{II. 80})$$

Où $\tilde{p}(y) \equiv p(x(y))$. Nous définissons la fonction $\phi(y, E)$ par :

$$\tilde{p}(y, E) = i\alpha y \phi(y, E) \quad (\text{II. 81})$$

On remplace dans (II. 80), on trouve :

$$(i\alpha y \phi(y, E))^2 + i\alpha y (i\alpha y \phi(y, E))' - \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] = 0$$

On dérive par rapport à y

$$-2\alpha^2 y^2 \phi^2(y, E) - \alpha^2 y \phi^2(y, E) - \alpha^2 y^2 \phi'(y, E) - \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] = 0$$

On simplifie le $-2\alpha^2 y^2$

$$\begin{aligned} \phi^2(y, E) + \frac{1}{y} \phi(y, E) + \phi'(y, E) + \frac{1}{\alpha^2 y^2} \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] &= 0 \\ \left(\phi + \frac{1}{2y} \right)^2 + \phi' - \frac{1}{4y^2} + \frac{1}{\alpha^2 y^2} \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] &= 0 \end{aligned} \quad (\text{II. 82})$$

Introduisons un autre changement de variable

$$\chi(y, E) = \phi(y, E) + \frac{1}{2y} \quad (\text{II. 83})$$

Par conséquent (II. 82) devient à :

$$\chi^2 + \left(\chi' + \frac{1}{2y^2} \right) - \frac{1}{4y^2} + \frac{1}{\alpha^2 y^2} \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] = 0$$

$$\chi^2 + \chi' + \frac{1}{4y^2} + \frac{1}{\alpha^2 y^2} \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] = 0 \quad (\text{II. 84})$$

Dans cette relation, χ a des pôles à $y = 0$ et aussi des pôles mouvantes entre les points de retournement.

Résidu au pôle fixe $y = 0$

Pour $y = 0$, nous définissons

$$\chi = \frac{b_1}{y} + a_0 + a_1 y + \dots \quad (\text{II. 85})$$

On substitue (II. 85) dans (II. 84),

$$\left(\frac{b_1}{y} + a_0 + a_1 y + \dots\right)^2 + \left(\frac{b_1}{y} + a_0 + a_1 y + \dots\right)' + \frac{1}{4y^2} + \frac{1}{\alpha^2 y^2} \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] = 0$$

On se limite au coefficient du variable $\frac{1}{y}$

$$\left(\frac{b_1^2}{y^2} + \dots\right) + \left(-\frac{b_1}{y^2} + \dots\right) + \frac{1}{4y^2} + \frac{1}{\alpha^2 y^2} \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] = 0$$

Maintenant on fait la correspondance des coefficients de $\frac{1}{y^2}$

$$\frac{b_1^2}{y^2} - \frac{b_1}{y^2} = -\frac{1}{4y^2} - \frac{1}{\alpha^2 y^2} \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right]$$

$$b_1^2 - b_1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{\alpha^2} \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] = 0$$

Les coefficients sont:

$$b_1 = \frac{1}{2} \left[1 \pm i \frac{2}{\alpha} \sqrt{|E - A^2|} \right] \quad (\text{II. 86})$$

Le résidu a deux valeurs, la valeur correcte est choisie en imposant la valeur de b_1 dans $\lim_{E \rightarrow 0}$ défini comme:

$$b_1 = \frac{A}{\alpha} + \frac{1}{2} \quad (\text{II. 87})$$

Le signe correct de b_1 est de choisir le signe négatif

$$b_1 = \frac{1}{2} \left[1 - i \frac{2}{\alpha} \sqrt{|E - A^2|} \right]$$

Alors

$$\chi = \frac{1}{2y} \left[1 - i \frac{2}{\alpha} \sqrt{|E - A^2|} \right]$$

Résidu à $y = \infty$

Maintenant nous déterminons le résidu pour le pôle à l'infini, pour cela nous effectuons le changement de variable donnée par:

$$y = \frac{1}{t}$$

Avec $\tilde{\chi}(t) \equiv \chi\left(\frac{1}{t}\right)$, alors (II.84) transforme à

$$\tilde{\chi}''(t) + \tilde{\chi}'(t) + \frac{1}{4}t^2 + \frac{1}{\alpha^2}\left[(E - A^2)t^2 - \frac{\alpha^2}{4} + \left(A + \frac{\alpha}{2}\right)\alpha t\right] = 0 \quad (\text{II. 88})$$

Nous considérons un développement de $\tilde{\chi}(t)$ en:

$$\tilde{\chi}(t) = d_0 + d_1 t + d_2 t^2 + \dots \quad (\text{II. 89})$$

Le résidu de $\tilde{\chi}(t)$ à $t = 0$ peut être obtenu à partir de l'intégrale suivant qui représente l'action quantique de Hamilton-Jacobi:

$$\frac{1}{2\pi} \oint_C p(x, E) dx \quad (\text{II. 90})$$

Dans ce cas le résidu est supposé d' être d_1 . Pour déterminer le résidu d_1 nous substituons (II. 89) dans (II. 88). Par conséquent (II. 89) se transforme à

$$\begin{aligned} & [d_0 + d_1 t + d_2 t^2 + \dots]^2 - t^2 [d_1 + 2d_2 t + \dots] + \frac{1}{4} t^2 \\ & + \frac{1}{\alpha^2} \left[(E - A^2) t^2 - \frac{\alpha^2}{4} + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha t \right] = 0 \end{aligned}$$

On correspond les termes équivalents dans l'égalité à gauche et à droite:

$$d_0 = \pm \frac{1}{2} \quad (\text{II. 91})$$

$$d_1 = -\frac{1}{2\alpha d_0} \left[A + \frac{\alpha}{2} \right] \quad (\text{II. 92})$$

Le signe correct pour d_0 est choisi par le carré de l'intégral de la fonction d'onde à savoir,

$$\psi(x) = \exp\left(i \int p(x, E) dx\right)$$

L'intégrale ci-dessus tend vers l'infini seulement si : $d_0 = -\frac{1}{2}$

$$\tilde{\chi}(t) = -\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha} \left[A + \frac{\alpha}{2} \right] t$$

II.5.3.2 La règle de quantification et les valeurs propres :

Nous obtiendrons maintenant les valeurs propres en imposant la règle de quantification de l'action de Hamilton-Jacobi.

$$J(E) = \frac{1}{2\pi} \oint_C p(x, E) dx = n\hbar$$

On a le changement de variable déjà défini $= \frac{2B}{\alpha} e^{-\alpha x}$, la condition de quantification devient :

$$J(E) = \frac{i}{2\pi} \oint_{C'} \left(\tilde{\chi} - \frac{1}{2y} \right) dy = n\hbar$$

Où C' est l'image dans le plan y du contour C dans le plan x , mais dans le sens contraire. plus les pôles mobiles, $\tilde{p}(y, E)$ a un pôle fixe à $y = 0$. γ_1 un petit cercle enfermant le point singulier $y = 0$, et le Γ_R est un cercle du grand rayon R tels qu'il enferme toutes les singularités de $p(x, E)$.

D'où

$$I_{\Gamma_R} = J(E) + I_{\gamma_1} \quad (\text{II. 93})$$

Où I_{γ_1} est l'intégrale pour le contour γ_1 enfermant le pôle $y = 0$ et I_{Γ_R} est l'intégrale pour le contour Γ_R .

L'intégrale sur le contour I_{γ_1} donne la valeur $-b_1$. Alors que la valeur de $J(E)$ est $-n$.

Maintenant pour évaluer l'intégrale I_{Γ_R} nous faisons une transformation de variable :

$$y = \frac{1}{t}$$

et par conséquent le contour se déforme à un nouveau contour Γ_r qui enferme les points singuliers $y = \infty$ ou $t = 0$. La valeur de l'intégrale I_{Γ_R} sur ce contour est $-d_1$.

Donc (II. 93) transforme à:

$$I_{\Gamma_r} = J(E) + I_{\gamma_1} \quad (\text{II. 94})$$

Pour obtenir les spectres des énergies de l'oscillateur de Morse on substitue dans (2.94) par les résidus résultant des pôles fixes et des pôles mobiles nous avons

$$-b_1 - n = -d_1 \quad (\text{II. 95})$$

Substituant les valeurs de b_1 et de d_1 nous obtenons

$$\frac{1}{2} \left[1 - i \frac{2}{\alpha} \sqrt{|E - A^2|} \right] + n = -\frac{1}{2\alpha d_0} \left[A + \frac{\alpha}{2} \right]$$

$$\frac{1}{2} - \frac{i}{\alpha} \sqrt{|E - A^2|} + n = \frac{1}{\alpha} \left[A + \frac{\alpha}{2} \right]$$

$$-\frac{i}{\alpha} \sqrt{|E - A^2|} + n = \frac{\alpha}{2}$$

$$E - A^2 = (A - \alpha n)^2$$

$$E = A^2 - (A - \alpha n)^2 \quad (\text{II. 96})$$

C'est le spectre de l'oscillateur de Morse.

II.5.3.3 Fonction d'onde de l'oscillateur de Morse :

Nous appliquons le formalisme de Hamilton-Jacobi, pour trouver les fonctions d'ondes

On a la l'équation de Hamilton-Jacobi après changement de variable :

$$\chi^2 + \chi' + \frac{1}{4y^2} + \frac{1}{\alpha^2 y^2} \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] = 0$$

Dans cette équation , χ a un pôle $y = 0$.

Nous utilisons le théorème de Liouville :

$$\chi = \frac{b_1}{y} + \sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{y - y_k} \right) + c \quad (\text{II. 97})$$

Où b_1 et c sont des constantes . Le résidu du χ en $y = 0$ est b_1 d'après (II. 87)

$$b_1 = \frac{A}{\alpha} + \frac{1}{2}$$

Comme nous l'avons vu dans le cas de l'oscillateur harmonique nous écrivons

$$\sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{y - y_k} \right) = \frac{P'(y)}{P(y)}$$

Où

$$P(y) = \prod_{k=1}^n (y - y_k)$$

On remplace (II. 97) dans (II. 84):

$$\frac{P''}{P} + 2 \frac{b_1}{y} \frac{P'}{P} + 2 \frac{P'}{P} c + 2 \frac{b_1}{y} c + c^2 - \frac{1}{4} + \frac{1}{\alpha y} \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) = 0 \quad (\text{II. 98})$$

On utilise l'approximations suivante pour les grand valeur de y .

$$\frac{P''(y)}{P(y)} \sim \frac{n(n-1)}{y^2} \quad , \quad \frac{P'(y)}{P(y)} \sim \frac{n}{y}$$

On remplace dans l'équation (II. 98) on correspond les terme équivalent de l'équation ce qui donne,

$$c = \pm \frac{1}{2} .$$

Le signe correct pour c est choisi par le carré de l'intégral de la fonction d'onde .Alors

$$c = -\frac{1}{2}$$

On obtient aussi

$$2b_1c + 2nc + \frac{1}{\alpha} \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) = 0 \quad (\text{2.99})$$

Utilisons les valeurs de b_1 et de c et aussi la valeur propre d'énergie :

$$E = A^2 - (A - \alpha n)^2 \quad (\text{2.100})$$

Substituons les valeurs de b_1 et c dans l'équation (II. 98) nous avons

$$yP''(y) + \{1 - y + 2(s - n)\}P'(y) + nP(y) = 0 \quad (\text{II. 101})$$

Comparons ceci avec l'équation différentiel de Laguerre

$$xy'' + (\beta + 1 - x) y' + ny = 0$$

Nous avons

$$P(y) \equiv L_{\beta}^n(y)$$

La fonction d'onde pour l'oscillateur de Morse est donnée par:

$$\psi(x) = \exp\left(i \int p(x, E) dx\right) \quad (\text{II. 102})$$

En termes de variable de y nous avons

$$\psi(y) = \exp\left(i \int \left[\frac{b_1}{y} + \frac{P'(x)}{P(x)} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2y}\right] dy\right) \quad (2.103)$$

Après l'intégration et la simplification nous obtenons

$$\psi_n(y) = y^{s-n} \exp\left(-\frac{1}{2}y\right) P(x) L_{\beta}^n(y) \quad (\text{II. 104})$$

Remplacement de la valeur de (x) nous avons

$$\psi_n(y) = y^{s-n} \exp\left(-\frac{1}{2}y\right) L_{\beta}^n(y) \quad (\text{II. 105})$$

Cette relation est la fonction d'onde de potentiel de Mores [12].

Dans ce chapitre, on a résolu l'équation de Hamilton-Jacobi pour l'oscillateur harmonique et puis pour l'oscillateur de Morse dont le hamiltonien est hermétique, il ya une autre classe d'hamiltonien qui ne respecte pas la condition de l'herméticité de Dirac, c'est l'hamiltonien non hermétique et \mathcal{PT} -symétrique, le chapitre suivant sera consacré pour l'étude de ce genre d'hamiltonien.

Chapitre III :

Etude d'un hamiltonien non hermitique et PT-symétrique

III.1 Introduction

Dans la mécanique quantique, il y a plusieurs opérateurs d'importance particulière dans la physique par exemple l'opérateur de la parité (\mathcal{P}), l'opérateur de renversement du temps (\mathcal{T}), dans ce chapitre nous allons illustrer l'importance de ces opérateurs pour certains hamiltonien qui ont une propriétés spéciale dite des hamiltonien non hermétiques.

III.2 L'opérateur de la parité \mathcal{P} et l'opérateur renversement de temps \mathcal{T} :

III.2.1 L'opérateur de la parité \mathcal{P} :

\mathcal{P} est un opérateur linéaire appelé opérateur de parité (ou réflexion de l'espace), la parité transforme les coordonnées spatiales en leurs opposées: $x \rightarrow -x$.

Par exemple la quantité de mouvement $P = m \frac{dx}{dt}$ est transformée en son opposée $-P$, l'actions de \mathcal{P} sur les opérateurs position \hat{x} et impulsion \hat{p} sont données respectivement par

$$\mathcal{P} \hat{x} \mathcal{P} = -\hat{x} \quad (\text{III.1})$$

$$\mathcal{P} \hat{p} \mathcal{P} = -\hat{p} \quad (\text{III.2})$$

L'effet de l'opérateur linéaire \mathcal{P} change les signes des opérateurs position \hat{x} et impulsion \hat{p} .

III.2.2 L'opérateur renversement de temps \mathcal{T} :

L'opérateur renversement du temps est l'opérateur qui consiste à changer le signe des coordonnées temporelles $t \rightarrow -t$.

\mathcal{T} est l'opérateur d'inversion du temps dont leurs actions sur les opérateurs position \hat{x} et impulsion \hat{p} sont données respectivement par :

$$\mathcal{T} \hat{x} \mathcal{T} = \hat{x} \quad (\text{III.3})$$

$$\mathcal{T} \hat{p} \mathcal{T} = -\hat{p} \quad (\text{III.4})$$

$$\mathcal{T} i \mathcal{T} = -i \quad (\text{III.5})$$

L'opérateur \mathcal{T} n'affecte que le signe de l'opérateur impulsion \hat{p} , en changeant le signe du nombre complexe imaginaire i .

Par conséquence, \mathcal{P} et \mathcal{T} sont des opérateurs de réflexion, leurs carrés donnent l'opérateur unité

$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{T}^2 = \mathbb{1} \quad (III.6)$$

Nous avons aussi

$$[\mathcal{P}, \mathcal{T}] = 0 \quad (III.7)$$

III.3 L'hamiltonien et la condition de l'herméticité de Dirac en mécanique quantique :

La condition de l'herméticité de H remonte aux débuts de la mécanique quantique.

L'herméticité de H est exprimé par l'équation :

$$H = H^+ \quad (III.8)$$

Où $+$ est de symbole de conjugaison de Dirac représente la combinaison entre les opérations de la transposition de matrice et de la conjugaison complexe .

III.3.1 Propriétés de l'opérateur hermitique :

Soit A et B sont des opérateur hermitique :

$$(A^+)^+ = A \quad (III.9)$$

$$(\lambda A)^+ = (\lambda^* A^+) \quad (III.10)$$

$$(A + B)^+ = A^+ + B^+ \quad (III.11)$$

Si A et B sont hermitiques, $A + B$ est hermitique.

$$(AB)^+ = B^+ A^+ \quad (III.12)$$

$$\langle \varphi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A^+ | \varphi \rangle^* \quad (III.13)$$

$$AB | \psi \rangle = A(B | \psi \rangle) = (\langle \psi | B^+) A^+ = \langle \psi | B^+ A^+ \quad (III.14)$$

$$\lambda A | \psi \rangle = \lambda (A | \psi \rangle) = \lambda^* \langle \psi | A^+ = \langle \psi | \lambda^* A^+ \quad (III.15)$$

Un opérateur est dit unitaire si : $UU^+ = U^+U = I$.

$$I^+ = I \quad (III.16)$$

$$0^+ = 0 \quad (III.17)$$

III.4 La symétrie réflexion espace-temps et l'opérateur \mathcal{PT} :

En mécanique quantique, la dynamique d'un système physique est complètement régie par son opérateur hamiltonien. Il a toujours été admis que l'hamiltonien doit être un opérateur linéaire et hermitien, la condition d'hermiticité est généralisée à toutes les observables physiques du système en plus de son hamiltonien.

L'idée centrale de la théorie quantique \mathcal{PT} -symétrique, est de remplacer l'hermiticité par la symétrie de réflexion d'espace-temps sans violer aucun des axiomes physiques de la mécanique quantique [13.14].

III.4.1 Définitions et propriétés de \mathcal{PT} -symétrie :

Un hamiltonien H est dit \mathcal{PT} -symétrique s'il satisfait la relation :

$$H = H^{\mathcal{PT}} \quad (III.18)$$

Où

$$H^{\mathcal{PT}} = (\mathcal{PT})H(\mathcal{PT}) \quad (III.19)$$

Ainsi, si un hamiltonien H est \mathcal{PT} -symétrique, il commute avec l'opérateur \mathcal{PT} ,

$$[H, \mathcal{PT}] = 0 \quad (III.20)$$

III.5 Hamiltonien non hermétique et \mathcal{PT} -symétrique:

Les hamiltoniens qui ne sont pas hermétiques ont été traditionnellement employés pour décrire le phénomène de la désintégration radioactive. La condition de l'hermiticité de Dirac n'est pas nécessaire dans ce cas (hamiltonien non-hermitien). la condition de l'hermiticité (III.8) peut être remplacée par la symétrie de la réflexion espace-temps (\mathcal{PT} -symétrique) $H = H^{\mathcal{PT}}$, pour obtenir un spectre réel.

Les propriétés de la \mathcal{PT} -symétrie ont été déjà définies dans la partie précédent.

III.5.1 Exemples physique de quelques hamiltoniens non-hermétiques :

Les hamiltoniens suivant représentent deux cas des hamiltoniens non-hermétiques :

$$H = p^2 + ix^3 \quad (III. 21)$$

Et

$$H = p^2 - x^4 \quad (III. 22)$$

les énergies des ces hamiltoniens ont des valeurs réelles et positives .

Les hamiltoniens dans (III. 21) et (III. 22) sont deux cas spéciales de l'hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique qui a la forme générale suivante

$$H = p^2 + x^2(ix)^\varepsilon \quad (III. 23)$$

Où , ε est un paramètre réel.

-Si $\varepsilon \geq 0$, toutes les valeurs propres de l'hamiltonians (III. 23) sont réelles et positives,

-Si $\varepsilon < 0$ les valeurs propres sont complexes [15].

III.5.2 Valeurs propres réelles d'un hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique :

Les fonctions propres de l'hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique sont aussi des fonctions propres de l'opérateur \mathcal{PT} , dans ce cas on dit que la \mathcal{PT} -symétrie est non-brisée.

S'il existe des fonctions propres de l'hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique qui ne sont pas des fonctions propres de l'opérateur \mathcal{PT} on dit que la \mathcal{PT} -symétrie brisée.

Soit $\{\phi_n(x), n = 1, 2 \dots\}$, l'ensemble des fonctions propres de H et \mathcal{PT} .

On a

$$H\phi_n = E_n\phi_n \quad (III. 24)$$

Et

$$\mathcal{PT}\phi_n = \lambda_n\phi_n \quad (III. 25)$$

Où E_n et λ_n sont respectivement les valeurs propres correspondantes à H et \mathcal{PT} , qui sont complexes.

Puisque

$$(\mathcal{PT})^2 = \mathbb{1} \quad (III. 26)$$

Il en résulte que

$$|\lambda_n|^2 = 1 \quad (III. 27)$$

Pour toutes les valeurs de n possibles.

$$\lambda_n = e^{i\alpha_n} \quad (III. 28)$$

Pour α_n réel.

Nous remplaçons l'état propre ϕ par $e^{i\alpha_n}\phi$ de sorte que sa valeur propre donne l'opérateur \mathcal{PT} soit égale à l'unité,

$$\mathcal{PT}\phi_n = \lambda_n\phi_n$$

$$\mathcal{PT}\phi_n = e^{i\alpha_n}e^{i\alpha_n}\phi_n$$

$$\mathcal{PT}\phi_n = |\lambda_n|^2\phi_n$$

$$\mathcal{PT}\phi_n = 1\phi_n$$

$$\mathcal{PT}\phi_n = \phi_n \quad (III. 29)$$

Puisque H et \mathcal{PT} commutent, on peut écrire :

$$\begin{aligned} [H, \mathcal{PT}] &= H\mathcal{PT} - \mathcal{PT}H \\ &= 0 \end{aligned} \quad (III. 30)$$

Donc

$$\mathcal{PT}H = H\mathcal{PT} \quad (III. 31)$$

En multipliant les deux cotés du membre de droite de cette équation par \mathcal{PT} , nous obtenons

$$\mathcal{PT}\mathcal{PT}H = \mathcal{PT}H\mathcal{PT}$$

$$(\mathcal{PT})^2H = \mathcal{PT}H\mathcal{PT}$$

Donc

$$\mathcal{PT}H\mathcal{PT} = H \quad (III. 32)$$

Maintenant nous écrivons l'équation de Schrödinger indépendante du temps sous la forme

$$H\phi_n = E_n\phi_n$$

En appliquant \mathcal{PT} à gauche sur les deux membres de cette équation, et tenant compte de (III.29) on obtient

$$\begin{aligned}
 H\phi_n &= E_n\phi_n \\
 H\mathcal{PT}\phi_n &= E_n\mathcal{PT}\phi_n \\
 H\mathcal{PT}\phi_n &= E_n\phi_n \\
 H\mathcal{PT}\mathcal{PT}\phi_n &= E_n\mathcal{PT}\phi_n \\
 H(\mathcal{PT})^2\phi_n &= E_n^*\phi_n \\
 H\phi_n &= E_n^*\phi_n
 \end{aligned} \tag{III.33}$$

Cette dernière relation, combinée avec (III.11), on obtient :

$$E_n = E_n^* \tag{III.34}$$

La valeur propre E est réelle [16.17].

III.6 Etude du spectre d'un hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique par la méthode de Hamilton-Jacobi :

Dans ce qui suit nous appliquons le formalisme quantique de Hamilton-Jacobi, défini dans un domaine complexe, à un hamiltoniens complexe, caractérisé par la parité et de renversement de temps (\mathcal{PT}) dans le but d'obtenir leurs valeurs propres et fonctions propres.

Comme nous l'avons vu dans une étude précédente la fonction de Hamilton-Jacobi est écrit comme :

$$p^2 - i\hbar p' = 2m[E - V(x)] \tag{III.35}$$

telle que $\hbar = 2m = 1$.

On a la condition de la quantification :

$$J = (1/2\pi) \oint_C p dx = n\hbar$$

L'expression pour le potentiel complexe de Scarf est donnée par :

$$V(x) = A \operatorname{sech}^2 x + iB \operatorname{sech} x \tanh x \quad (III. 36)$$

On a la définition de la fonction du moment quantique :

$$p = -i\hbar \frac{d}{dx} (\ln \psi) \quad (III. 37)$$

On pose :

$$q = \frac{d \ln \psi}{dx}$$

$$p = -iq$$

L'équation quantique correspondante de Hamilton-Jacobi, en termes de q , est :

$$p^2 - i p' = [E - V(x)]$$

$$(-iq)^2 - i \frac{d}{dx} (-iq) - E + (A \operatorname{sech}^2 x - iB \operatorname{sech} x \tanh x) = 0$$

Alors

$$q^2 + \frac{dq}{dx} + E - A \operatorname{sech}^2 x - iB \operatorname{sech} x \tanh x = 0 \quad (III. 38)$$

On utilise le changement de variable $y = i \sinh x$, dans l'équation (III. 38) on obtient l'équation quantique de Hamilton-Jacobi pour χ :

$$\chi = \left(\phi - \frac{y}{2(1-y^2)} \right)$$

Et

$$q = i \left(\sqrt{1-y^2} \right) \phi$$

Donc on obtient la nouvelle forme de l'équation de Hamilton-Jacobi [18] :

$$\chi^2 + \frac{d\chi}{dy} + \frac{2 + y^2}{4(1 - y^2)^2} - \frac{E}{1 - y^2} - \frac{A - By}{(1 - y^2)^2} = 0$$

Dans ce chapitre on exposé les propriétés d'un hamiltonien non hermétique et \mathcal{PT} -symétrique, on a reformulé l'équation de Hamilton–Jacobi et on a démontré qu'il est possible de calculer le spectre et les valeurs propres de ce genre d'hamiltonien par la méthode de quantification de Hamilton-Jacobi.

Conclusion générale

Dans ce travail on a appliqué la méthode de Hamilton-Jacobi sur un système constitué d' un oscillateur harmonique unidimensionnelle, et puis nous avons effectué une étude détaillé sur l'oscillateur harmonique en mécanique quantique en utilisant la méthode de Hamilton-Jacobi, nous avons également étudié un autre type d'oscillateurs dit oscillateur de Morse par la méthode de Hamilton-Jacobi.

En employant la méthode de Hamilton-Jacobi nous avons calculé les valeurs propres et les vecteurs propre dans les deux systèmes, l'oscillateur harmonique et l'oscillateur de Morse, nous avons présenté les détails de calcul qui ont été essentiellement basés sur la méthode des résidus, dans le but de déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres de l'énergie, nos résultats étaient parfaitement identiques aux celles obtenus dans le cas ordinaire lors de la résolution de l'équation de Schrödinger pour un oscillateur harmonique.

La théorie quantique de Hamilton-Jacobi est une théorie bien développée et fournit une voie indépendante et souvent utile pour résoudre des équations dynamique. En particulier, pour les mouvements périodiques, et permet d'obtenir des solutions pour un système donné directement sans avoir résoudre des équations de mouvement.

Finalement on a essayé d'appliquer le formalisme quantique de Hamilton-Jacobi sur un système d'hamiltonein non hermétique et \mathcal{PT} -symétrique, dont on a construit l'équation de Hamilton–Jacobi, on a utilisé comme exemple le potentiel complexe de Scarf.

Annexes

Annexes

A. polynôme d' Hermite:

L'équation différentielle de Hermite est définie par :

$$\frac{d^2y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + 2ny = 0 \quad (\text{A. 1})$$

Où n est un nombre réel. Si n est un nombre entier positif, les solutions de l'équation différentielle de Hermite sont des polynômes appelés *polynômes de Hermite* $H_n(x)$

[19].

Les premiers polynômes de Hermite sont :

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = 2x$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$$

....

Les polynômes de Hermite peuvent être exprimés par la somme

$$H_n(x) = \sum_{k=0}^{[n/2]} (-1)^k \frac{n!}{k! (n-2k)!} 2x^{n-2k} \quad (\text{A. 2})$$

Et par la formule de Rodrigues

$$H_n(x) = e^{x^2} \left(-\frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2} \quad (\text{A. 3})$$

Leur fonction génératrice est donnée par

$$e^{2tx-t^2} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{H_n(x)t^n}{n!} \quad (\text{A. 4})$$

Ils vérifient les relations d'orthogonalité

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm} \quad (A.5)$$

Et les relations de récurrence

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - H_{n-1}(x)$$

$$\frac{dH_n}{dx} = 2nH_{n-1}(x)$$

$$\frac{d}{dx}(e^{-x^2} H_n(x)) = e^{-x^2} H_{n+1}(x) \quad (A.6)$$

B. Théorème des résidus :

Soit Z_0 un point singulier d'une fonction $f = (Z_0)$ on appelle résidu de la fonction $f = (Z_0)$ au point Z_0 le nombre donné par le symbole $Res(f = (Z_0))$ qui vérifie l'égalité :

$$Res(f(Z_0)) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(Z) dZ \quad (B.1)$$

- La résidu en un point singulier éliminable est nul
- Si le point Z_0 est un pôle d'ordre n de la fonction $f(Z)$, alors :

$$Res(f(Z_0)) = \frac{1}{(n-1)!} \lim_{Z \rightarrow Z_0} \left[\frac{d^{n-1}((Z - Z_0)^n f(Z))}{d^{n-1}Z} \right] \quad (B.2)$$

- Si la fonction $f(Z) = \frac{\varphi(Z)}{\psi(Z)}$

de plus :

Si $\varphi(Z_0) \neq 0$

$$\psi(Z_0) = 0 \text{ et } \psi'(Z_0) \neq 0$$

C'est à dire Z_0 est un pôle simple .

$$Res(f(Z_0)) = \frac{\varphi(Z_0)}{\psi'(Z_0)} \quad (B.3)$$

- Si le point Z_0 est un point singulier essentielle de la fonction $f(Z)$

$$\text{Res}(f(Z_0)) = a_{-1}$$

Avec a_{-1} c'est le coefficient dans le développent en série de Laurent de la fonction $f(Z)$ au voisinage de Z_0 .

B.1 Théorème des résidus de Cauchy :

Théorème : si une fonction $f(Z)$ est analytique sur la frontière C d'un domaine D et partout à l'intérieur de D . et nombre fini de points singuliers $Z_1, Z_2, \dots \dots \dots Z_n$ alors :

$$\oint_C f(Z) dZ = 2\pi i \sum_{k=1}^n \text{Res}(f(Z_k)) \quad (\text{B.4})$$

B.2 Application des résidus au calcul des intégrales définies :

$$f(x) = \frac{P_m(x)}{Q_n(x)} \quad (\text{B.5})$$

P_m et Q_n polynômes de degré m et n respectivement

Si $f(x)$ est continue sur l'axe réel et $n \geq m + 2$, alors

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 2\pi i \sigma \quad (\text{B.6})$$

Avec σ est la somme des résidus de la fonction $f(x)$ [20] .

Bibliographie

- [1] S. Bikas Pal, *Hamilton Jacobi Formalism in Quantum Mechanics*, fichier pdf internet.
- [2] F. Elbaz, *Mécanique quantique*, Edition Marketing, 21, (1985).
- [3] A. Chaliar, A. Berard et M.F. Charlier, *Mécanique analytique*, Edition Marketing, 43, (1989).
- [4] N. Ershaidat, *Quantum Mechanics*, Phys. 251. chapitre 5, Lecture 18.
- [5] E. Chpolski, *Physique atomique*, tome I, Traduction Français Edition Mir, (1977).
- [6] S. Bikas Pal, *Quantum Hamilton Jacobi Theory and Eikonal Approximation*, (11 décembre 2009).
- [7] E. Kartheuser, *Eléments de Mécanique quantique*, tome 1, fichier pdf internet.
- [8] D. Sénéchal, *Mécanique quantique*, Phys-731, Université de Sherbrooke, (Avril 2000).
- [9] F. Mila, *Physique Quantique I et II*, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, (Avril 2010).
- [10] R.S. Bhalla, A.K. Kapoor et P.K. Panigrahi, *Quantum Hamilton-Jacobi formalism and the bound state spectra*, arXiv:quant-ph / 9512018v2 (17 Jan1996).
- [11] R.A. Leacock et M.J. Padgett, Phys. Rev. D, vol 28.no 10, 2493, (1983).
- [12] K.G. Geojo, *Quantum Hamilton-Jacobi study of wave functions and energy spectrum of solvable and quasi-exactly solvable models*, Thèse de Doctorate, University of Hyderabad, (Décembre 2003).
- [13] P.F. Giraud, *Etude de modes de désintégration non charmée du méson B et recherche de la violation de la symétrie CP*, Thèse de Doctorat, Université de Paris-sud U.F.R, (2003).
- [14] A. Idir, *Résolution de l'équation de Dirac à (1+1)-dimensions pour quelques modèles de potentiels PT-symétriques et de masses dépendantes de l'espace*, Mémoire de Magister, Université de Mentouri-Constantine (2010).

- [15] C.M. Bender, Making Sense of Non-Hermitian Hamiltonians, arXiv:hep-th/070309v1, (9 Mar 2007), Rep. Prog. Phys.
- [16] K. Boubakeur, *La pseudo hermiticité et sa généralisation aux systèmes dépendants du temps*, Mémoire de magister, (Université de Mentouri-Constantine, 2010).
- [17] A. Mostafazadeh, Pramana journal of physics, vol. 73. no.1, 269, (2009).
- [18] S.S. Ranjani¹, A.K. Kapoor¹ et P.K. Panigrahi, *Quantum Hamilton-Jacobi analysis of PT symmetric Hamiltonians*, arXiv:quanr-ph/0403054v1 (6 Mar 2004).
- [19] G. Goldstein, *Techniques de résolution numérique de l'équation de Schrödinger dépendant du temps*, Université Libre de Bruxelles (année académique 2002-2003).
- [20] N. Amroun, *Théorème des Résidus*, chapitre 4, fichier pdf internet.

ملخص

في هذا العمل قدمنا طريقة هاميلتون-جاكوبي لدراسة المسائل القابلة للحل تماما في ميكانيكا الكم، حيث استخدمنا هذه الطريقة لدراسة نظام يتكون من هزاز توافقي بسيط (بعد واحد) ونظام آخر يتكون من هزاز مورس. وجدنا القيم والأشعة الذاتية للهاز التوافقي وهزاز مورس، و في الأخير تطرقنا إلى التناظر (موضع - زمن)، وطبقنا نظرية هاميلتون-جاكوبي على hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique.

الكلمات المفتاحية: معادلة شرودنجر، هزاز توافقي، هزاز مورس، نظرية هاميلتون-جاكوبي، التناظر (موضع - زمن).

Résumé

Dans ce travail on a présenté l'approche de Hamilton-Jacobi pour l'étude des problèmes solubles en mécanique quantique, on a appliqué l'approche dans l'étude d'un système constitué d'un oscillateur harmonique simple (unidimensionnel), et un oscillateur de Morse, on a calculé les valeurs propres et les vecteurs propre dans les deux cas, et puis on a défini la symétrie réflexion espace-temps (\mathcal{PT} -symétrie) et finalement on a appliqué la méthode de Hamilton-Jacobi sur hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique.

Mots clés : Equation de Schrödinger, oscillateur harmonique, oscillateur de Morse, formalisme de Hamilton-Jacobi, \mathcal{PT} -symétrie.

Abstract

In this work we presented the Hamilton-Jacobi approach to the study of solvable problems in quantum mechanics, we applied the approach to the study of a system consisting of a simple harmonic oscillator (one-dimensional) and a Morse oscillator, we calculated the eigen-values and eigen-functions in two states, and then defined the space-time reflection symmetry (\mathcal{PT} -symmetry) and finally applied the method of Hamilton-Jacobi at hamiltonian \mathcal{PT} -symmetrical.

Key words: Schrödinger equation, harmonic oscillator, Morse oscillator, Hamilton-Jacobi formalism, \mathcal{PT} -symmetry.