Table des matières

Introduction

Introduction générale

La théorie de la mécanique quantique dans son formalisme actuel s'est faite très rapidement entre 1925 et 1927, et apparait comme le fruit de la Conjonction exceptionnelle des talents de physiciens et de mathématiciens Comme Schrödinger, Heisenberg, Born, Bohr, Dirac, Pauli, Hilbert, Von Neumann, etc. [1].

C'est en 1925 qu'Erwin Schrödinger prend connaissance du travail de Louis De Broglie. Il est à la fois séduit par les idées et reste sceptique quant au fond, pour des raisons tenant à l'invariance relativiste. Vivement encouragé Par plusieurs collègues, dont Debye et Einstein, Schrödinger met à profit sa Compétence en matière d'´equations aux dérivées partielles pour construire, ce qu'on appelle la mécanique ondulatoire. L'apport le plus marquant des travaux de Schrödinger réside Dans la construction d'une équation d'onde régissant le comportement d'une Particule placée dans un potentiel (ou un champ de forces).

L'équation de Schrödinger est une équation de base de la mécanique quantique décrivant l'évolution dans le temps de la fonction d'onde d'un système quantique arbitraire, elle remplace l'équation fondamentale de la dynamique classique $\vec{F} = \frac{d\vec{P}}{dt}$.

L'équation de Schrödinger a été établie sous sa forme primitive en 1926 par Erwin Schrödinger. Elle reprenait les idées des mathématiciens Hamilton et Félix Klein pour prolonger la théorie des ondes de matière de De Broglie .Donc, Schrödinger découvrit une équation aux dérivées partielles décrivant un système mécanique hamiltonien de premier ordre par rapport au temps et de deuxième ordre par rapport à la position, elle prend la forme : $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = H\psi(\vec{r},t)$.

Depuis la fondation de la mécanique quantique entre les années 1923 et 1927, la recherche des solutions exactes des équations d'onde, dans un cadre non relativiste ou dans un contexte relativiste, continue de susciter l'intérêt des chercheurs parallèlement au développement des modèles de potentiels proposés pour décrire des interactions nucléaires en physique nucléaire ou des interactions interatomiques en physique atomique ou moléculaire en chimie quantique. Comme exemple, nous pouvons citer en premier lieu le potentiel d'interaction entre nucléons dans le noyau suggéré par Woods-Saxon [2].

Dans cette mémoire, on va résoudre l'équation de Schrödinger pour le potentiel de woods-Saxon dépendant du temps. Le potentiel de Woods-Saxon (WS) joue un rôle essentiel dans la physique nucléaire : il est utilisé pour décrire l'interaction des nucléons dans le noyau. Bien que la solution exacte de l'équation de Schrödinger stationnaire non relativiste a été résolu pour l'état fondamental [3], mais la solution de cette équation pour le potentiel de (WS) dépendant du temps n'est pas trouvé dans la littérature de physique.

Pour résoudre cette équation, nous avons utilisé la méthode des invariants qui a été introduite par Lewis et Riesenfeld [4] et qui est devenu actuellement un outil très utile et puissante pour les systèmes quantiques général dont l'opérateur Hamiltonien est explicitement dépendant du temps.

La mémoire est subdivisée comme suit :

Le premier chapitre est consacré à l'équation de Schrödinger stationnaire (indépendante du temps) avec ses méthodes de solution et à l'équation de Schrödinger dépendante du temps avec ses méthodes de solution.

À partir de ces derniers, on va préciser la méthode des invariants dans le second chapitre. Dans le troisième chapitre, on présentera la solution de l'équation de Schrödinger à une dimension associée au potentiel de Woods-Saxon (WS) dépendant du temps.

Chapitre I

L’´equation de Schrödinger

L’´equation de Schrödinger :

1-Introduction :

L’équation de Schrödinger est l’équation fondamentale de la mécanique quantique non relativiste. Elle joue en mécanique quantique le même rôle fondateur que l’équation de Newton en mécanique classique ou les équations de Maxwell en électromagnétisme. Elle décrit l’évolution temporelle de l’état d’un objet quantique représenté par une fonction d’onde [5].

2-Construction de l’équation de Schrödinger :

2.1-Naissance de l’équation (contexte historique) :

Au début du XX[e] siècle, il était devenu clair que la lumière présente une dualité onde-corpuscule, c'est-à-dire qu'elle pouvait se manifester, selon les circonstances, soit comme une particule, le photon, soit comme une onde électromagnétique. Louis de Broglie proposa de généraliser cette dualité à toutes les particules connues bien que cette hypothèse eût pour conséquence paradoxale que les électrons devaient pouvoir produire des interférences comme la lumière, ce qui fut vérifié ultérieurement par l'expérience. Par analogie avec le photon, Louis De Broglie associa ainsi à chaque particule libre d'énergie E et de quantité de mouvement p une fréquence ν et une longueur d'onde λ [6].

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

Le physicien autrichien Erwin Schrödinger utilisa les résultats de De Broglie pour établir une équation régissant l’évolution spatiale et temporelle de la fonction d’onde $\psi(\vec{r},t)$ d’un système physique. Pour obtenir l’équation de Schrödinger prenons la formule de l’onde plane de De Broglie :

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

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

$$E = \hbar\omega \tag{I-2}$$

$$\vec{P} = \hbar\vec{K} \tag{I-3}$$

Alors:

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

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

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

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

Alors:

$$E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{I-7}$$

Est l'opérateur d'énergie.

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

$$\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) = \frac{i}{\hbar}\vec{P}\psi(\vec{r},t)$$

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

Donc:

$$\vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla} \tag{I-9}$$

p : est l'opérateur d'impulsion.

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

$$T = \frac{p^2}{2m} \tag{I-10}$$

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

En appliquant le principe de correspondance entre les valeurs classiques et quantiques, pour l'énergie, et l'impulsion de l'équation(7) et(9) on obtient :

Donc l'équation de Schrödinger devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) \tag{I-11}$$

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

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

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \tag{I-12}$$

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

$$H\psi(\vec{r},t) = E\,\psi(\vec{r},t) \tag{I-13}$$

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

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(r) \tag{I-14}$$

Avec cette nouvelle valeur d'énergie et à partir de l'équation (11) et l'opérateur p ,l'équation de Schrödinger devient :

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

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

$$H == -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \tag{I-16}$$

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = H\psi(\vec{r},t) \tag{I-17}$$

2.2-Propriétés de L'équation de Schrödinger:

L'équation de Schrödinger a les propriétés suivantes :

- Linéaire et homogène en $\psi(x,t)$: si ψ_1 et ψ_2 sont des solutions de ces équations, toute combinaison linéaire$\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$ de ces fonctions en est également solution. Ainsi ces solutions possèdent en générale la propriété de superposition caractéristique des ondes.
- Les équations de Schrödinger dépendants du temps sont des équations différentielles du premier ordre par rapport au temps par conséquent, si on connait ψ a un instant initial (x,t_0) on peut déterminer son évolution, ceci montre que l'étal dynamique du système est entièrement déterminé par la fonction ψ.
- Si l'hamiltonien du système ne dépend pas du temps, la solution de l'équation de Schrödinger s'écrit sous la forme:

$$\psi(x,t) = \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{I-18}$$

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

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \tag{I-19}$$

E : La valeur propre de l'hamiltonien.

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

3-La fonction d'onde:

Les solutions de l'équation de Schrödinger d'un système quantique sont appelées les fonctions d'onde, elles peuvent être considérées comme un postulat quantique qui décrit l'état quantique d'une particule et contient toutes les informations qu'on veut connaitre du système. Cette fonction doit satisfaire les conditions suivantes:

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

$$\int \psi^* \psi \, d^3r = \int |\psi|^2 \, d^3r = 1 \qquad \text{(I-20)}$$

C'est la condition de normalisation, cette relation montre que $\psi\,(\vec{r}, t)$ est interprétée comme une amplitude de probabilité de présence d'une particule à la position $\vec{r}$ à l'instant t. La probabilité de trouver la particule dans tout l'espace, à l'instant t , est égale à l'unité.

$$P = \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 \, d^3r = 1 \qquad \text{(I-21)}$$

Avec $|\psi(\vec{r}, t)|^2$est la densité de probabilité. La fonction d'onde et sa dérivée doivent être continues dans tout l'espace.

4-Solution de l'équation de Schrödinger :

4.1-Introduction :

Depuis la publication du travail de Schrödinger, les physiciens théoricien se sont penchés à trouver des solutions à partir des plusieurs méthodes mathématiques pour résoudre l'équation de Schrödinger. Soit analytique ou numérique, a partir de cette solution, on obtient une fonction d'onde qui nous permet de d'identifier le système quantique étudié [7].

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

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

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

4.2--solution de l'équation de Schrödinger :

4.2.1-L'équation de Schrödinger stationnaire :

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

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

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

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

Avec $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, où $\vec{\nabla}$ l'operateur de dérivés partielles, en cordonnées cartésiennes est défini par :

$$\vec{\nabla} = \vec{\imath}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{\jmath}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z} \quad \text{(I-24)}$$

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

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

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) \quad \text{(I-25)}$$

A cette mémoire, on va traiter l'équation de Schrödinger à une dimension :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) \qquad \text{(I-26)}$$

Séparant les variables :

$$\psi(x,t) = \varphi(x)f(t) \qquad \text{(I-27)}$$

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

$$\left(i\hbar\frac{df}{dt}\right)\varphi(x) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + v(x)\,\varphi(x)\right\}f(t) \qquad \text{(I-28)}$$

Par conséquence:

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} = \frac{\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+v(x)\,\varphi(x)\right\}}{\varphi} \qquad \text{(I-29)}$$

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

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} = E \qquad \text{(I-30)}$$

Et par conséquent :

$$f(t) = Ae^{-iEt/\hbar} \qquad \text{(I-31)}$$

Tandis que :

$$0-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + v(x)\,\varphi(x) = E\varphi(x) \qquad \text{(I-32)}$$

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

Donc

$$\psi(x,t) = Ae^{\frac{-iEt}{\hbar}}\varphi(x) \qquad \text{(I-33)}$$

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

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - v(x))\,\varphi(x) = 0 \qquad \text{(I-34)}$$

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

4.3.1-méthodes numériques :

On cite par exemple : méthode d'Euler, Heun, Euler améliorée, Rung et Kutta , approximation successives etc.

4.3.2-méthodes analytiques:

a-la méthode de perturbation :

Pour un problème stationnaire ou non stationnaire, l'idée est de séparer le Hamiltonien en deux parties : $H = H_0 + w$ telles que l'on sache résoudre le problème pour H_0,alors que w est considéré comme une petite correction. On appelle l'opérateur w: la perturbation .

H_0 : est appelée hamiltonien non perturbé

Si w ne dépend pas du temps, la perturbation est dite stationnaire.

Cette méthode s'applique dans le cas du système stationnaire ou non stationnaire. L'hamiltonien est écrit sous la forme :

$$H = H_0 + w \qquad \text{(I-35)}$$

Où H_0 est un opérateur indépendant du temps et dont on connait les valeurs propres et les états propres et w est un opérateur dont les éléments de matrice dans une représentation donnée sont petits par rapport à ceux de H_0.

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

Pour assurer que w est plus petit que H_0 on introduit un paramètre réel $(\lambda \ll 1)$ ce qui permet d'installer progressivement la perturbation et on écrit alors :

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V \qquad \text{(I-36)}$$

V est de l'ordre de H_0.

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

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

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

a.1-La résolution de l'équation de perturbation aux valeurs propres de$H\ (\lambda)$:

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

$$H\,(\lambda)\,|\psi\,(\lambda)>=\,E\,(\lambda)\,|\psi\,(\lambda)\,> \qquad \text{(I-37)}$$

En remplaçant $H\,(\lambda)$ par l'expression (36) dans l'équation (37) devient:

$$(H_0+\,\lambda V)\,|\psi\,(\lambda)\,>=\,E\,(\lambda)\,|\psi\,(\lambda)\,> \qquad \text{(I-38)}$$

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

$$E\,(\lambda)=\,\varepsilon_0+\,\lambda\,\varepsilon_1+\lambda^2\varepsilon_2+\cdots+\lambda^p\varepsilon_p+\cdots=\sum_{p=0}^{\infty}\lambda^p\varepsilon_p \qquad \text{(I-39)}$$

$$|\psi(\lambda)\,>=\,|\psi^0>\,+\lambda\,|\,\psi^1\,>\,+\,...+\,\lambda^p\,|\,\psi^p\,>=\,\sum_{p=0}^{\infty}\lambda^p|\,\psi^p\,> \qquad \text{(I-40)}$$

Nous reportons ces développement dans l'équation (38) on obtient :

$$(H0\,+\,\lambda V)\,(\sum_{p=0}^{\infty}\lambda^p\,\,|\,\,\psi^p\,\,>)\,=\,(\sum_{p=0}^{\infty}\lambda^p\varepsilon_p\,)\,(\sum_{p=0}^{\infty}\lambda^p\,\,|\,\,\psi^p\,>) \qquad \text{(I-41)}$$

L'égalité des coefficients de puissances successive de λ dans les deux membres donne

l'ensemble des équations sont appelées équation de perturbation:

Pour les termes d'ordre 0 : (λ^0)

$$(H_0-\varepsilon_0)\,|\,\psi^0>=0 \qquad \text{(I-42)}$$

Pour les termes d'ordre 1: (λ^1)

$$(H_0-\varepsilon_0)\,\,|\,\psi^1>\,+(V-\,\,\varepsilon_1\,)\,|\,\psi^0>=0 \qquad \text{(I-43)}$$

Pour les termes d'ordre 2: (λ^2)

$$(H_0-\varepsilon_0)|\psi^2>\,+(V-\varepsilon_1)|\psi^1>-\,\,\varepsilon_2|\psi^0>=0 \qquad \text{(I-44)}$$

Pour les termes d'ordre p: (λ^p)

$$(H_0-\varepsilon_0)|\psi^p>+(V-\varepsilon_1)|\psi^{p-1}>-\varepsilon_2|\psi^{p-2}>\cdots-\varepsilon_p|\psi^0=0 \qquad (\mathrm{I}-45)$$

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

b-1-La correction d'énergie

On a trouvé la correction à l'énergie d'ordre 1 jusqu' à l'ordre 2 par la projection des équations de perturbation (I-41) sur l'état $|\psi^0>$ qui donne en tenant compte

$$<\psi^0|\psi^0>=1 \qquad \text{(I-46)}$$

La correction au premier ordre à l'énergie non dégénéré est égale à la valeur moyenne

de la perturbation V dans l'état non-perturbé $|\emptyset_n>$ Donc

$$\varepsilon_1=<\psi^0\,|\mathrm{V}\,|\psi^0>=<\emptyset_n|V|\emptyset_n> \qquad \text{(I-47)}$$

Avec : $\qquad H_0|\emptyset_n>=E_n|\emptyset_n>$

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

$$\varepsilon_2 = \sum_{m\neq n} \frac{|<\emptyset_n|V|\emptyset_m>|^2}{E_n - E_m} \quad \text{(I-48)}$$

b-2-La correction au vecteur propre :

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

$$|\psi^1 > = \sum_{m\neq n} \frac{|<\emptyset_m|V|\emptyset_n>|^2}{E_n - E_m} |\emptyset_m > \quad \text{(I-49)}$$

La correction au $2^{\text{éme}}$ ordre est:

$$\left|\psi^2 > = \sum_{m\neq p} \sum_{n\neq p} \left(C_n \frac{<\emptyset_m|V|\emptyset_n>}{E_p - E_m} - \frac{C_m <\emptyset_p|V|\emptyset_p>}{E_p - E_m}\right) |\emptyset_m > - \frac{1}{2} \sum_n |C_n|^2 |\emptyset_p > \right. \quad \text{(I-50)}$$

Avec: $$C_n = \frac{<\emptyset_n|V|\emptyset_p>}{E_p - E_m}$$

Les valeurs propres et les vecteurs propres de l'Hamiltonien perturbé H s'obtiennent en utilisant les développements (I-39) et (I-40). On obtient donc :

$$|\psi >= |\emptyset_n > + \sum_{m\neq n} \frac{|<\emptyset_n|w|\emptyset_m>|^2}{E_n - E_m} |\emptyset_m > + \cdots \quad \text{(I-51)}$$

Et

$$\mathrm{E} = E_n + <\emptyset_n|\mathrm{w}\, |\emptyset_n > + \sum_{m\neq n} \frac{|<\emptyset_n|w|\emptyset_m>|^2}{E_n - E_m} + \cdots \quad \text{(I-52)}$$

b-La méthode variationnelle :

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

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

Donc on a:

$$H|\varphi_n > = E_n|\varphi_n > \qquad \text{(I-53)}$$

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

$$|\psi > = \Sigma_n |\varphi_n >< \varphi_n|\psi > \qquad \text{(I-54)}$$

Et : $E_0 \leq E_n$

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

$$< H > = \frac{<\psi| H|\psi>}{<\psi|\psi>} \qquad \text{(I-55)}$$

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

$$< \psi|H |\psi > = \Sigma_n E_n \,| < \varphi_n|\psi > |^2 \geq E_0 \Sigma_n | < \varphi_n|\psi > |^2 = E_0 < \psi| \psi > \qquad \text{(I-56)}$$

(La moyenne d'une série de nombre est plus grande que le plus petit des nombres de cette série)

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

$$< H > = \frac{<\psi| H| \psi>}{<\psi| \psi>} \geq E_0 \qquad \text{(I-57)}$$

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

4.2.2-L'équation de Schrödinger dépendant du temps:

4.2.2.1-Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps :

Différentes méthodes existent pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Le choix d'une méthode particulière repose généralement sur la forme du potentiel et sur celle de la fonction d'onde recherchée. En pratique, il existe plusieurs techniques de résolutions. Le but est de trouver la solution $| \psi(t) >$correspondant à la condition initiale $| \psi(t_0) >$; pour cela on peut citer quelques méthodes intéressantes qui ont une relation directe avec ce qui va suivre de notre travail [9].

a-Méthodes approximatives :

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

a.1-La théorie des perturbations :

Il n'existe que peu de problèmes physiques pour lesquels on puisse trouver pour le modèle envisagé, une solution mathématique simple. Dans la plupart des cas une solution approchée doit être cherchée. La théorie des perturbations constitue une de ces approximations. L'idée générale de la méthode est de dégager les effets principaux qui rendent compte globalement du comportement du système, et ensuite de détailler certaines quantités qui découlent d'effets secondaires moins importants. Donc l'Hmiltonien du système s'écrit :

$$H(t) = H_0(t) + \lambda w(t) \tag{I-58}$$

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

Il est montré que :

$$U(t,t_0) = U^{(0)}(t,t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t,t_0) \tag{I-59}$$

Avec $U^{(0)}(t,t_0)$ est la solution de l'équation non perturbée. Les $U^{(0)}(t,t_0), \forall n > 1$ sont données par :

$$U^{(n)}(t,t_0) = (i\hbar)^{-n}\lambda^n \int_{t>t_n>t_{n-1}\ldots>t_0} dt_n\, dt_{n-1} \ldots dt_1\, U^{(0)}(t,t_n) w(t_n) U^{(0)}(t_n,t_{n-1}) w(t_{n-1})$$

$$\ldots U^{(0)}(t_2,t_1) w(t_1)\, U^{(0)}(t_1,t_0) \tag{I-60}$$

La théorie des perturbations s'applique en générale aux cas où $H_0(t)$ est indépendant du temps et la où la partie dépendant du temps $W(t)$ est petite par rapport à H_0et peut être considérée comme une perturbation, c'est-à-dire on peut toujours l'écrire sous la forme $W(t) = \lambda V(t)$; $V(t)$ est de l'ordre de grandeur de H_0.

A l'inverse de la théorie des perturbations indépendant du temps, on ne peut pas parler ici des corrections des valeurs propres car les énergies dans ce cas ne sont pas conservées .Mais cette méthode permet de calculer approximativement les fonctions d'onde à partir des états stationnaires du système non perturbé.

a.2-Méthodes variationnelle :

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

$$\langle H(t)\rangle = \frac{\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle}{\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle} \tag{I-61}$$

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

a.3- L'Approximation soudaine

L'opérateur d'évolution vérifie :$\lim_{T\to 0} \mathrm{U}(\mathrm{T}+t_0, t_0) = 1$. Dans le cas extrême où l'hamiltonien du système varie subitement avec le temps on parle d'approximation soudaine, c'est-à-dire on appel approximation soudaine, l'approximation appliquée dans le cas limite, « . . . A la limite où, c'est-à-dire dans le cas du passage infiniment rapide, l'état dynamique du système reste inchangé . . . » [10].

a.4- L'approximation adiabatique

Dans l'autre cas extrême où l'hamiltonien du système varie lentement avec le temps, C'est-à-dire $T \to +\infty$; on parle de l'une des méthodes les plus puissantes en mécanique quantique : l'approximation adiabatique. Parmi l'une des résultats de ces applications dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps : la phase de Berry où phase géométrique. Á travers ce dernier on peut donner aux lecteurs une interprétation sur le rôle de l'approximation adiabatique dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps [10].

b-Méthodes exactes :

b.1- *Transformations unitaires*

Il est important de se rappeler que pour décrire l'évolution du vecteur d'état $|\psi(t)>$ dans l'espace de Hilbert, on doit choisir un système d'axes ou un référentiel. Le choix de référentiel n'a pas de raison d'être unique, c'est-à-dire que l'on est libre de passer à un autre système d'axes. Chaque fois que l'on change de référentiel, on change de point de vue et par conséquent on observe le système physique sous un angle différent. En pratique, pour passer d'un référentiel à un autre, on utilise des opérateurs unitaires U qui peuvent être indépendants ou dépendants du temps et qui satisfont la condition [10] :

$$\mathrm{U}^{+}U = U\mathrm{U}^{+} = 1 \qquad \text{(I-62)}$$

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

$$|\tilde{\psi}(t) >= \mathrm{U}^{-1} |\, \psi(t) > \qquad \text{(I-63)}$$

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

$$\tilde{H}(\mathrm{t}) = \mathrm{U(t)}^{-1}\, H(t)\mathrm{U(t)} - i\hbar\mathrm{U(t)}^{-1}\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{U(t)} \qquad \text{(I-64)}$$

Le but général d'un changement de référentiel est de trouver une représentation dans laquelle l'évolution temporelle du système physique paraît la plus simple. Souvent, un changement de représentation peut nous apporter de nouvelles interprétations physiques ou des avantages techniques comme par exemple la qualité de convergence numérique d'un calcul.

Donc les transformations unitaires servent d'outils de recherche de nouvelles représentations. Par exemple, dans le nouveau référentiel, on aimerait être capable d'effectuer une séparation de variables entre la partie temporelle et la partie spatiale du vecteur d'état $|\tilde{\psi}(t) >$. En d'autres termes, on cherche des opérateurs unitaires qui mettraient l'hamiltonien original $H(t)$ sous une forme factorisable,) $\tilde{H}(t) = \sum_n h_n(t)\, T_n$ ou $\tilde{H}(t) = g(t)k$, où les T_n et k sont indépendants du temps. Dès lors, on pourrait intégrer analytiquement l'équation de Schrödinger impliquant $\tilde{H}(t)$ pour obtenir l'opérateur d'évolution temporelle dans le nouveau référentiel.

Dans cet esprit, de nombreuses études dans la littérature de physique mathématique ont porté sur la recherche ou l'identification de systèmes, surtout atomiques, qui admettent une solution exacte dans un certain type de référentiel. Efthimou et Spector ont ainsi identifié des classes de systèmes qui admettent une séparation exacte de variables espace/temps et ils ont donnés aussi des transformations unitaires pour obtenir le nouveau référentiel dépendant du temps.

b.2-La théorie des invariants :

Parmi les méthodes les plus puissantes et qui donnent de solutions exactes de l'équation de Schrödinger dépendante de temps, nous avons la méthode des invariants [11].

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

b.3- Opérateur d'évolution

Du fait de la correspondance linéaire entre $|\psi(t_0)>$ et $|\psi(\mathrm{t})>$, il existe un opérateur linéaire unitaire $U(t,t_0)$, tel que [11] :

$$|\psi(\mathrm{t})> = U(t,t_0)|\psi(t_0)> \qquad \text{(I-65)}$$

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

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \qquad \text{(I-66)}$$

Effectivement, en prenant la dérivée partielle par rapport au temps de la fonction (66), on obtient :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0) \qquad \text{(I-67)}$$

On note que l'équation (66) présente le même degré de difficulté que l'équation de Schrödinger, mais elle présente plus d'avantage lors de l'utilisation des méthodes d'approximation.

L'opérateur d'évolution total peut être ainsi décomposé en un produit d'opérateurs d'évolutions temporelles infinitésimales :

$$U(t,t_0) = U(t,t_k)U(t_k,t_{k-1}) \dots\dots\dots .. U\,(t_2,t_1)U(t_1,t_0) \qquad \text{(I-68)}$$

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

$$U(t,t_0) = \prod_{i=1}^{N} U_i(t_i, t_i - \Delta t) \qquad \text{(I-69)}$$

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

Un cas particulier de la transformation (66), ayant de multiples applications dans la théorie de diffusion des particules, est celui où l'état initial est fixé non pas pour $t_0 = 0$; mais pour $t_0 = -\infty$;et l'état final $|\psi(t)>$ est considéré pour $t = +\infty$; l'éq. (72) s'écrit alors :

$$|\psi(+\infty)>= U(+\infty;-\infty)|\psi(-\infty)> \quad \text{(I-70)}$$

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

$$U = U(+\infty;-\infty) = lim_{t\to+\infty, t_0\to-\infty} U(t,t_0) \quad \text{(I-71)}$$

Cet opérateur porte le nom de matrice de diffusion.

b.4- Changement de représentation

Jusqu'à présent un mode de description a été généralement employé ; il s'agissait de la description de Schrödinger. En réalité, elle n'est pas la seule représentation possible. En fait, il n'est pas toujours nécessaire de trouver la solution de l'équation de Schrödinger qui contient souvent trop d'information par rapport aux questions que l'on se pose et alors, l'intégration explicite de l'équation (67) [10],

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0) \quad \text{(I-72)}$$

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

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

$$i\hbar\frac{d}{dt}A_H(t) = [A_H(t), H(t)] + i\hbar(\frac{d}{dt}A_s(t))_H \quad \text{(I-73)}$$

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

Chapitre II

La théorie des invariants

La théorie des invariants

1-Introduction :

La théorie des invariants représente l'un des méthodes puissantes pour résoudre les systèmes dépendants du temps. Dans cette partie de notre travail, nous donnerons quelques notions essentielles concernant la théorie des invariants qui permettrons aux lecteurs d'avoir une idée sur le rôle de la théorie des invariants quand à la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps [12].

Dans ce chapitre, on va illuminer les notions de base et quelques définitions essentielles concernant la théorie des invariants, on va aussi exposer toutes les étapes à suivre pour construire un invariant du système.

2- Les invariants :

On considère l'équation de Schrödinger suivante :

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

Où H est l'hamiltonien de système, c'est un opérateur auto-adjoint explicitement dépendant du temps [14].

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

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

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

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

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

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

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

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

Cela veut dire que l'opérateur vérifie une solution de l'équation de Schrödinger, sur une autre solution de cette même équation. Ce résultat est valide pour tout invariant [13].

2.1- Propriétés de l'invariant :

2.1.1- Valeurs propres de l'invariant *I* :

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

L'équation aux valeurs propres s'écrit comme suit [14]:

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

Avec le produit hermitien sur l'espace des états :

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

Cet invariant, a un spectre constant au cour du temps, c'est à dire que les valeurs propres de cet opérateur, sont indépendantes du temps.
En dérivant l'équation(8) par rapport au temps, on obtient:

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

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

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

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

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

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

$$\left\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}\middle|i\hbar\,\frac{\partial I}{\partial t}\middle|\varphi_{\lambda k}\right\rangle + \langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}|IH|\varphi_{\lambda k}\rangle - \langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}|\lambda H|\varphi_{\lambda k}\rangle = 0 \qquad \text{(II-14)}$$

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

$$i\hbar\left\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}\middle|\frac{\partial I}{\partial t}\middle|\varphi_{\lambda k}\right\rangle + (\grave{\lambda}-\lambda)\left\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}\middle|H\middle|\varphi_{\lambda k}\right\rangle = 0 \qquad \text{(II-16)}$$

Pour : $\grave{\lambda} = \lambda$

$$\left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial I}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle = 0 \tag{II- 17}$$

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

$$\left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial I}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle + \left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| I \frac{\partial}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle = \left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial \lambda}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle + \boldsymbol{\lambda} \left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle \tag{II-18}$$

$$\left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial I}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle + \boldsymbol{\lambda} \left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle = \left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial \lambda}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle + \boldsymbol{\lambda} \left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle \tag{II-19}$$

$$\left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial I}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle = \left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial \lambda}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle \tag{II-20}$$

$$\left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial I}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} \langle \varphi_{\lambda k} | \varphi_{\lambda k} \rangle \tag{II-21}$$

On a:

$$\langle \varphi_{\lambda k} | \varphi_{\lambda k} \rangle = \delta_{\lambda \lambda} \delta_{kk} = 1 \tag{II-22}$$

Alors :

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial I}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle \tag{II-23}$$

Ce qui implique :

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \left\langle \varphi_{\lambda k} \middle| \frac{\partial I}{\partial t} \middle| \varphi_{\lambda k} \right\rangle = 0 \tag{II-24}$$

2.1.2- Les vecteurs propres de *I* :

Pour trouver le rapport entre les vecteurs propres et les solutions de l'équation du Schrödinger, on écrit d'abord l'équation du mouvement de $|\varphi_{\lambda k}\rangle$ [14].
En commençant par l'équation (8) et en utilisant l'équation (24), on obtient :

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

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

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

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

$$\left\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}\right|(\lambda - I)\frac{\partial}{\partial t}\left|\varphi_{\lambda k}\right\rangle = \left\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}\right|\frac{\partial I}{\partial t}\left|\varphi_{\lambda k}\right\rangle \qquad \text{(II.28)}$$

$$(\lambda - \grave{\lambda})\left\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}\right|\frac{\partial}{\partial t}\left|\varphi_{\lambda k}\right\rangle = \left\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}\right|\frac{\partial I}{\partial t}\left|\varphi_{\lambda k}\right\rangle \qquad \text{(II.29)}$$

On déduit que :

$$i\hbar\left\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}\right|\frac{\partial I}{\partial t}\left|\varphi_{\lambda k}\right\rangle + (\lambda - \grave{\lambda})\,\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}|\,H|\varphi_{\lambda k}\rangle = 0 \qquad \text{(II-30)}$$

Donc

$$i\hbar(\lambda - \grave{\lambda})\left\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}\right|\frac{\partial}{\partial t}\left|\varphi_{\lambda k}\right\rangle = (\lambda - \grave{\lambda})\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}|\,H|\varphi_{\lambda k}\rangle \qquad \text{(II-31)}$$

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

$$i\hbar\left\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}\right|\frac{\partial}{\partial t}\left|\varphi_{\lambda k}\right\rangle = \langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}|\,H|\varphi_{\lambda k}\rangle \qquad \text{(II-32)}$$

Si (32) est valable pour $\lambda = \grave{\lambda}$ aussi bien que pour $\lambda \neq \lambda'$, alors on déduit immédiatement que $|\varphi_{\lambda k}\rangle$ satisfait l'équation de Schrödinger, c'est-à-dire, $|\varphi_{\lambda k}\rangle$ est une solution particulière de l'équation de Schrödinger.
Lorsque les phases des états stationnaires ne sont pas fixées, on choisi un autre ensemble de vecteurs propres de *I* multiplié par un facteur de phase dépendant du temps.
Alors :

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

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

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

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

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

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

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

$$-\hbar\frac{\partial\alpha_{\lambda k}}{\partial t}\langle\varphi_{\lambda' k'}|\varphi_{\lambda K}\rangle+\left\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}\middle|i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\middle|\varphi_{\lambda k}\right\rangle=\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}|\mathrm{H}|\varphi_{\lambda k}\rangle \qquad \text{(II-38)}$$

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

$$\hbar\frac{\partial\alpha_{\lambda k}}{\partial t}\;\delta_{\lambda\lambda}\delta_{kk}=\left\langle\varphi_{\grave{\lambda}\grave{k}}\middle|\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right]\middle|\varphi_{\lambda k}\right\rangle \qquad \text{(II-40)}$$

Donc on obtient :

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

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

2.2- Solution générale :

Du fait que chacun de ces nouveaux états propres satisfait l'équation de Schrödinger, la solution générale est donnée par [14] :

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

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

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

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

Chapitre III

Application de la théorie des invariants sur le potentiel de Woods-Saxon dépendant du temps

Application de la théorie des invariants sur le potentiel de Woods-Saxon dépendant du temps

Dans ce chapitre, nous essayerons d'obtenir la solution de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle pour le potentiel de Wood-Saxon dépendant du temps. Ce potentiel n'est pas étudié dans la littérature de physique. Le potentiel de Woods-Saxon est un potentiel moyen pour l'interaction entre les nucléons dans le noyau atomique, il joue un rôle principal en physique nucléaire, et en physique des particules élémentaires [15].

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

$$H(x,t) = Z(t)p^2 - \frac{Y(t)}{1+qe^{-\mu_0 x}} \qquad \text{(III-1)}$$

Les paramètres Z et Y sont des fonctions dépendantes du temps, alors que q *et* μ_0 sont des constantes.

Cet opérateur $I(t)$ est invariant lorsqu' il satisfait la condition [16] :

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

Tel que $I(t)^+ = I(t)$.

L'équation de Schrödinger dépendante du temps est :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \qquad \text{(III-3)}$$

On cherche une solution sous la forme :

$$\psi_\lambda(x,t) = e^{i\alpha_\lambda(t)}\varphi_\lambda(x,t) \qquad \text{(III-4)}$$

Avec :

$$I\varphi_\lambda(x,t) = \lambda\varphi_\lambda(x,t) \qquad \text{(III-5)}$$

Où λ est la valeur propre de $I(t)$. La phase globale $\alpha_\lambda(t)$ est donnée par

$$\frac{d\alpha_\lambda(t)}{dt}\varphi_\lambda(x,t) = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(t)\right)\varphi_\lambda(x,t) \qquad \text{(III-6)}$$

1-Construction de l'invariant

On propose l'invariant sous la forme :

$$I = Ap + Bx + Cp^2 + Dx^2 + \frac{K}{x} + \frac{L}{x^2} - \frac{E}{1+qe^{-\mu_0 x}} + F(xp+px) + G\left(\frac{1}{x}p + p\frac{1}{x}\right) + J$$

(III-7)

Où $A, B, C, D, E, F, G, K, L\ et\ J$: sont des fonctions arbitraires dépendantes du temps à déterminer.

Nous utilisons l'équation (2), nous obtenons les équations suivantes :

$\dot{A} + 2BZ = 0, \dot{C} + 4FZ = 0, \dot{F} + 2DZ = 0, EZ - CY = 0, A = 0, \dot{E} = 0, \dot{D} = 0, \dot{K} = 0, \dot{L} = 0, \dot{G} = 0, \dot{J} = 0, G = 0, L = 0, K = 0, F = 0,$

(III-8)

Alors :

$$A = 0, B = 0, C = C_0, D = 0, E = E_0, F = 0, G = 0, K = 0, L = 0, J = J_0, \frac{E_0}{C_0} = \frac{Y}{Z} \qquad \text{(III-9)}$$

Ou $C_0, E_0\ et\ J_0$ sont des constantes réelles.

Donc l'invariant peut s'écrire comme:

$$I = C_0 p^2 - \frac{E_0}{1 + q\, e^{-\mu_0 x}} + J_0 \qquad \text{(III-10)}$$

1.1-Valeurs et états propres de l'invariant

Il reste à obtenir les états et les valeurs propres de l'invariant $I(t)$ c'est-à-dire la solution de l'équation de l'invariant :

$$I\varphi = \lambda\varphi \qquad \text{(III-11)}$$

Avec :

$$I = C_0 p^2 - \frac{E_0}{1 + q e^{-\mu_0 x}} + J_0 \qquad \text{(III-12)}$$

On remplace I dans l'équation (11), on obtient :

$$\left(C_0 p^2 - \frac{E_0}{1 + q e^{-\mu_0 x}} + J_0 - \lambda\right) \varphi = 0 \qquad \text{(III-13)}$$

Où $$P = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\left(-\hbar^2 C_0 \frac{d^2}{dx^2} - \frac{E_0}{1 + q e^{-\mu_0 x}} + J_0 - \lambda\right) \varphi = 0 \qquad \text{(III-14)}$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{E_0}{\hbar^2 C_0} \frac{1}{1 + q e^{-\mu_0 x}} + \frac{\lambda - J_0}{\hbar^2 C_0}\right) \varphi = 0 \qquad \text{(III-15)}$$

On pose:

$$S = 1 + qe^{-\mu_0 x} \tag{III-16}$$

$$\frac{d}{dx} = \frac{ds}{dx}\frac{d}{ds} = \mu_0(1-s)\frac{d}{ds} \tag{III-17}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} == \mu_0{}^2(1-s)^2\frac{d^2}{ds^2} - \mu_0{}^2(1-s)\frac{d}{ds} \tag{III-18}$$

D'où:

$$\varphi^{"} - \frac{s}{(1-s)s}\varphi^{'} + \frac{1}{s^2(1-s)^2}[-\lambda_1 s^2 + \lambda_2 s]\varphi = 0 \tag{III-19}$$

Avec **:** $\lambda_1 = \frac{J_0 - \lambda}{\mu_0{}^2\hbar^2 c_0}$, $\lambda_2 = \frac{E_0}{\mu_0{}^2\hbar^2 c_0}$

L'équation au dessus a la forme suivante:

$$\varphi^{"} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{(1-\alpha_3 s)}\varphi^{'} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{s^2(1-\alpha_3 s)^2}\varphi = 0 \tag{III-20}$$

Pour résoudre cette équation nous utilisons la méthode de Nikiforv-Uvarov (N-U) [4].

2. La méthode (N-U)

La méthode (N-U) a été proposée et appliquée pour réduire l'équation différentielle du second ordre à l'équation de type hypergéométrique par une transformation appropriée de coordonnées $s = s(t)$ comme suit [17] :

$$\psi^{"}(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\psi^{'}(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\psi(s) = 0 \tag{III-21}$$

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

$$\psi(s) = \emptyset(s)y(s) \tag{III-22}$$

L'eq. (21) devienne :

$$\sigma(s)y^{"}(s) + \tau(s)y^{'}(s) + \nu y(s) = 0 \tag{III-23}$$

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

$$\frac{\emptyset(s)^{'}}{\emptyset(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \tag{III-24}$$

L'autre partie $y(s)$ est le type de la fonction hypergéométrique dont les solutions polynomiales sont données par la formule de Rodrigues [19] :

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s)\rho(s)] \qquad \text{(III-25)}$$

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

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho \qquad \text{(III-26)}$$

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

$$\pi(s) = \frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma} - k\sigma} \qquad \text{(III-27)}$$

$$\nu = k + \pi' \qquad \text{(III-28)}$$

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

$$\nu = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma'' \qquad \text{(III-29)}$$

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) \qquad \text{(III-30)}$$

Et son dérivé est négatif.

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

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1-\alpha_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{s^2(1-\alpha_3 s)^2}\right]\psi = 0 \qquad \text{(III-31)}$$

Nous pouvons résoudre ceci comme suit. Lorsque l'eq. (31) est comparée avec l'eq. (20), nous obtenons

$$\tilde{\tau} = \alpha_1 - \alpha_2 s \qquad \text{(III-32)}$$

$$\sigma = s(1 - \alpha_3 s) \qquad \text{(III-33)}$$

Et aussi

$$\tilde{\sigma} = -\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3 \qquad \text{(III-34)}$$

En substituent ceux-ci dans l'eq. (27)

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5 s \pm \sqrt{(\alpha_6 - k\alpha_3)s^2 + (\alpha_7 + k)s + \alpha_8} \qquad \text{(III-35)}$$

Où

$$\alpha_4 = \frac{1}{2}(1-\alpha_1), \qquad \text{(III-36)}$$

$$\alpha_5 = \frac{1}{2}(\alpha_2 - 2\alpha_3), \qquad \text{(III-37)}$$

$$\alpha_6 = \alpha_5^2 + \xi_1, \qquad \text{(III-38)}$$

$$\alpha_7 = 2\alpha_4\alpha_5 - \xi_2, \qquad \text{(III-39)}$$

$$\alpha_8 = \alpha_4^2 + \xi_3, \qquad \text{(III-40)}$$

Dans l'eq. (35), la fonction sous la racine carrée doit être le carrée d'un polynôme conformément à la méthode de (N-U), de telle sorte que

$$k_{1,2} = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) \mp 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \qquad \text{(III-42)}$$

Ou, nous définissons

$$\alpha_9 = \alpha_3\alpha_7 + \alpha_3^2\alpha_8 + \alpha_6 \qquad \text{(III-43)}$$

Pour chaque K les fonctions π sont obtenues. Pour

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) - 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \qquad \text{(III-44)}$$

π devienne

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5 s - \left[\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}}\right)s - \sqrt{\alpha_8}\right] \qquad \text{(III-45)}$$

Pour le même$K$, pour Eqs. (30), (32) et (35)

$$\tau = \alpha_1 + 2\alpha_4 - (\alpha_2 - 2\alpha_5)s - 2\left[\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right)s - \sqrt{\alpha_8}\right] \qquad \text{(III-46)}$$

Et

$$\tau' = -(\alpha_2 - 2\alpha_5) - 2\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) = -2\alpha_3 - 2\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) < 0 \qquad \text{(III-47)}$$

Sont obtenues. Quant l'eq. (28) est utilisée avec l'eq. (46) et l'eq. (47) l'équation suivante est dérivée:

$$\alpha_2 n - (2n+1)\alpha_5 + (2n+1)\left(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) + n(n-1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} = 0$$

(III-48)

Cette équation donne le spectre de l'énergie pour le problème donné. Pour l'eq. (26)

$$\rho(s) = s^{\alpha_{10}-1}(1-\alpha_3 s)^{\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3}-\alpha_{10}-1} \tag{III-49}$$

Est trouvé et lorsque cette équation est utilisée dans l'eq. (25)

$$y_n = P_n^{\left(\alpha_{10}-1,\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3}-\alpha_{10}-1\right)}(1-2\alpha_3 s) \tag{III-50}$$

Est obtenue, où,

$$\alpha_{10} = \alpha_1 + 2\alpha_4 + 2\sqrt{\alpha_8} \tag{III-51}$$

$$\alpha_{11} = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) \tag{III-52}$$

Et $P_n^{(\alpha,\beta)}$ sont les polynômes de Jacobi. Utilisant l'eq. (24)

$$\emptyset(s) = s^{\alpha_{12}}(1-\alpha_3 s)^{-\alpha_{12}-\frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} \tag{III-53}$$

Est obtenue et le la solution générale devienne

$$\psi = \phi(s)y(s) \tag{III-54}$$

$$\psi = s^{\alpha_{12}}(1-\alpha_3 s)^{-\alpha_{12}-\frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} P_n^{\left(\alpha_{10}-1,\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3}-\alpha_{10}-1\right)}(1-2\alpha_3 s) \tag{III-55}$$

Ici, les fonctions alpha sont données par :

$$\alpha_{12} = \alpha_4 + \sqrt{\alpha_8} \tag{III-56}$$

$$\alpha_{13} = \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) \tag{III-57}$$

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

$$lim_{\alpha_3\to 0} P_n^{\left(\alpha_{10}-1,\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3}-\alpha_{10}-1\right)}(1-2\alpha_3 s) = L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11}s) \tag{III-58}$$

$$lim_{\alpha_3\to 0}(1-\alpha_3 s)^{-\alpha_{12}-\frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} = e^{\alpha_{13}s} \tag{III-59}$$

La solution donnée dans l'eq. (55) devienne

$$\psi = s^{\alpha_{12}} e^{\alpha_{13}s} L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11}s) \tag{III-60}$$

Dans certains cas, on est besoin d'une deuxième solution de l'Eq. (35). Dans ce cas, si la même procédure est suivie on utilisant

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \tag{III-61}$$

Cette solution devienne

$$\psi = s^{\alpha_{12}^{*}}(1-\alpha_3 s)^{-\alpha_{12}^{*}-\frac{\alpha_{13}^{*}}{\alpha_3}} P_n^{\left(\alpha_{10}^{*}-1,\frac{\alpha_{11}^{*}}{\alpha_3}-\alpha_{10}^{*}-1\right)}(1-2\alpha_3 s) \qquad \text{(III-62)}$$

Est le spectre d'énergie est

$$\alpha_2 n - 2n\alpha_5 + (2n+1)\left(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) + n(n-1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} + \alpha_5 = 0$$
(III-63)

Les paramètres prédéfinis alpha sont les suivants :

$$\alpha_{10}^{*} = \alpha_1 + 2\alpha_4 - 2\sqrt{\alpha_8} \qquad \text{(III-64)}$$

$$\alpha_{11}^{*} = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2\left(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) \qquad \text{(III-65)}$$

$$\alpha_{12}^{*} = \alpha_4 - \sqrt{\alpha_8} \qquad \text{(III-66)}$$

$$\alpha_{13}^{*} = \alpha_5 - \left(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) \qquad \text{(III-67)}$$

Si nous comparons l'éq. (31) avec l'éq. (20), nous obtenons les paramètres α_i :

$\alpha_1 = 0 \,, \alpha_2 = 1,$

$$\alpha_3 = 1, \xi_1 = \lambda_1, \xi_2 = \lambda_2, \xi_3 = 0, \alpha_4 = \frac{1}{2}, \ \alpha_5 = -\frac{1}{2}, \alpha_6 = \lambda_1 + \frac{1}{4}, \alpha_7 = -\frac{1}{2} - \lambda_2, \alpha_8 = \frac{1}{4}, \alpha_9 = \lambda_1 - \lambda_2, \alpha_{10} = 2, \alpha_{11} = 3 + 2\sqrt{\lambda_1 - \lambda_2}, \alpha_{12} = 1, \alpha_{13} = -1 - \sqrt{\lambda_1 - \lambda_2}$$

(III-68)

1. L'énergie:

$$E = -\frac{Z}{C_0}E_0 - \frac{{\mu_0}^2\hbar^2 Z}{4(n+1)^2}\left[\frac{E_0}{{\mu_0}^2\hbar^2 C_0} - (n+1)^2\right]^2 \qquad \text{(III-69)}$$

Où n: est un nombre entier.

2. La fonction d'onde:

$$\varphi(s) = A_n s(1-s)^{\sqrt{\lambda_1-\lambda_2}} P_n^{\left(1,2\sqrt{\lambda_1-\lambda_2}\right)}(1-2s) \tag{III-70}$$

Où $P_n^{(\alpha,\beta)}$: sont les polynômes de Jacobi.

A_n: La constante de normalisation.

3. Calcul de la phase totale et la solution de l'équation de Schrödinger :

On a:

$$\psi(s,t) = e^{i\,\alpha_\lambda(t)}\varphi(s) \tag{III-71}$$

$\alpha_\lambda(t)$: est La phase globale, qui est donné par la formule suivante :

$$\hbar\,\dot{\alpha}\varphi = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)\varphi \tag{III-72}$$

On a: $$\frac{\partial}{\partial t}\varphi = 0, H = \frac{Z}{C_0}(I - J_0)$$

D'ou

$$\alpha(t) = \frac{J_0-\lambda}{C_0\hbar}\int_0^t Z\left(t'\right)dt' + \alpha(0) \tag{III-73}$$

Alors, la solution générale est :

$$\psi(x,t) = B_n\, e^{i\alpha}\left(1 + qe^{-\mu_0 x}\right)e^{-\mu_0\sqrt{\lambda_1-\lambda_2}x} P_n^{\left(1,2\sqrt{\lambda_1-\lambda_2}\right)}\left(-1 - 2qe^{-\mu_0 x}\right) \tag{III-74}$$

Où $B_n = (-q)^{\sqrt{\lambda_1-\lambda_2}}A_n$.

Conclusion :

Dans cette mémoire on a présenté la méthode de la construction de l'équation de Schrödinger, et on a effectué sa solution pour un hamiltonien indépendant du temps, par contre si l'hamiltonien du système est une fonction du temps, dans ce cas on est obligé de résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps, c'est l'objectif de notre travail dans cette mémoire. Pour résoudre ce problème on a appliqué une méthode très efficace, qui donne la solution analytique exacte de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. L'idée de cette méthode c'est la construction d'un operateur hermitien qui dépend explicitement du temps, une fois que cet operateur est établi on peut alors calculer la solution exacte de l'équation de Schrödinger, en calculant, les valeurs propres, la phase globale, et les états propres en résolvant une équation différentielle du second ordre de type hypergéométrique.

Dans ce travail, nous avons obtenus la solution exacte de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle pour le potentiel de Wood-Saxon dépendant du temps. Nous avons utilisés la méthode des invariants proposé par (Lewis et Riesenfeld) pour obtenir la solution de l'équation de Schrödinger en terme de solution de l'équation différentielle du deuxième degré, cette méthode est devenu actuellement un outil très utile et puissant pour les systèmes quantiques dont l'opérateur Hamiltonien est explicitement dépendant du temps.

Nous avons appliqué la méthode (N-U) pour réduire l'équation différentielle du second ordre à l'équation de type hypergéométrique. Nous avons obtenus la forme finale des fonctions d'ondes en termes de polynômes de Jacobi et ainsi le spectre d'énergie.

Pour compléter ce travail, nous imposeront prochainement aux paramètres q et α d'être dépendants du temps. Ceux-ci constituent une partie de nos perspectives que nous sommes déjà entrain d'investiguer.

Annexe

1-Relations de commutation :

Les relations de commutation utiles pour les calculs des invariants

$$[x,p]=i\hbar \tag{A-1}$$

$$[x^2,p^2]=2i\hbar(xp+px) \tag{A-2}$$

$$[xp+px,x^2]=-4i\hbar x^2 \tag{A-3}$$

$$[xp+px,p^2]=4i\hbar p^2 \tag{A-4}$$

$$[xp+px,p]=2i\hbar p \tag{A-5}$$

$$[xp+px,x]=-2i\hbar x \tag{A-6}$$

$$\left[p^2,\frac{1}{x}\right]=2i\hbar\frac{p}{x^2} \tag{A-7}$$

$$\left[p^2,\frac{1}{x^2}\right]=4i\hbar\frac{p}{x^3} \tag{A-8}$$

$$[x, p^2] = 2i\hbar p \tag{A-9}$$

$$[p, x^2] = -2i\hbar x \tag{A-10}$$

$$\left[p^2, \frac{1}{x}p + p\frac{1}{x}\right] = 4i\hbar\frac{p^2}{x^3} \tag{A-11}$$

$$\left[x, \frac{1}{x}p + p\frac{1}{x}\right] = 2i\hbar\frac{1}{x} \tag{A-12}$$

BIBLIOGRAPHIE

BIBLIOGRAPHIE

[1]Mécanique quantique : cours de l'école polytechnique, Jean-Louis Basdevant et Jean Dalibard (février 2002).

[2] M.A. Preston and R.K. Bhaduri, Structure of the nucleus (1975).

[3] Flugge, S., Practical Quantum Mathematics, Spring-Verlag, berlin, (1974).

[4] Lewis HR Jr and Riesenfeld WB 1969 J. Math.Phys. 10 1458.

[5] Goldstein, Université Libre de Bruxelles Faculté des Sciences Appliquées
Année académique (2002-2003).

[6] E. Schrödinger, “The non relativistic équation of the de Broglie waves,” Ann. Physik 79,361-376 (1926).
[7] D.Blokhintsev, Principe de mécanique quantique (1981)
[8] PA-101-PC02 Travaux dirigés de physique quantique.

[9] - Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics , Vol 1,2 .

[10] C.J. Efthimiou and D. Spector, Phys.Rev. A 49 (1994) 2301

[11] S. Mnouar, Thèse de Doctorat ès Sciences, (Université de Sétif, 2010)

[12] Mazyar Mirrahimi, Contrôlabilité des Systèmes Quantiques, Mémoire de DUA, Analyse Numérique de paris VI ,75272paris cedex 06, rapport interne CAS no E/181 ,6juin 2003

[13] A.M. Markov, Invariant and the Evolution of Nonstationnary Quantum Systems, (New York, 1989).

[14] L. Krache, Thèse de Doctorat, (Université de Sétif, 2010).

[15] C.Berkdemir, A.Bekdemir and R.Sever, J.Math.Chem. 43,944(2008).

[16]] H. Bekkar, F. Benamira and M. Maamache1 Phys. Rev A **68**, 016101 (2003) .

[17] Sameer M. Ikhdair and Ramazan Sever,
_Department of Physics, Near East University, Nicosia, North Cyprus, Mersin-10, Turkey
,Middle East Technical University,Department of Physics,06531 Ankara, Turkiye
February 7, 2007

[18]. A.F.Nikiforov, and V.B.Uvarov, special Functions of Mathematical Physics.