

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

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT : DE PHYSIQUE

N° : ph th 05 / 2019



DOMAINE : Sciences de la matière

FILIERE : Physique

OPTION : PHYSIQUE DES
PARTICULES À HAUTE ENERGIE

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: BENDAOU D ELKHANSA

CHAMI KARIMA

Intitulé

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

Soutenu le 01 /07 /2019 devant le jury composé de:

Abdelmadjid. M AIRECHE	Université M'sila	Président
Salim .MEDJBER	Université M'sila	Rapporteur
Mourad. DABABI	Université M'sila	Examineur
Samra .NAHAOUA	Université M'sila	Examineur

Année universitaire : 2018/2019

Remerciements

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

Je tiens, avant tout, à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur le Professeur: Medjber Salim, mon promoteur. Je le remercie pour sa gentillesse et sa disponibilité, j'ai eu le grand plaisir de travailler sous sa direction.

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

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

DEDICACES

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

In Chaa Allah.

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

*Je le dédie à mes frères et sœurs.
A tous mes amis sans citer les noms.*

Table des matières

Introduction générale

Introduction	4
--------------------	---

Chapitre I : L'équation de Schrödinger indépendante du temps

1-introduction	7
2-Construction de l'équation de Schrödinger	7
3- Solution de l'équation de Schrödinger	10
3.1-Introduction.....	10
3.2-La fonction d'onde	10
3.3-L'équation de Schrödinger stationnaire.....	11
3.3-1-L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension.....	13
3.3-2-L'équation de Schrödinger stationnaire à deux dimensions	13
3.3-3-L'équation de Schrödinger stationnaire à trois dimensions	13
a)La séparation des variables.....	14
3.4-Quelques méthodes mathématiques de résolution de l'équation de Schrödinger	16
3.4.1-Les méthodes numériques	16
3.4.2-Les méthodes analytiques.....	17
a)la méthode de perturbation.....	17
a.1-La résolution de l'équation de perturbation aux valeurs propres de $H(\lambda)$	18
a.2 - La correction d'énergie	19
a.3-La correction au vecteur propre.....	20
b) La méthode variationnelle.....	20
b.1- Principe de la méthode	21

Chapitre II : L'équation de Schrödinger dépendante du temps

1-Introduction	24
2-Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps...	24
2.1- Méthodes approximatives.....	24
2.1.1- La théorie de perturbation	24

2-1-2 –La méthode variationnelle	25
2.1.3- L'approximation soudaine.....	26
2.1.4-L'approximation adiabatique.....	26
2.2 -Méthodes exactes	26
2.2.1.Transformations unitaires	26
2.2.2- Opérateur d'évolution	28
2.2.3. Changement de représentation	29
2.2.4. La théorie des invariants.....	30
2.2.4.1 Introduction	30
2.2.4. 2.Représentation de la théorie des invariants.....	31
2.2.4.3. Les invariants	31
2.2.4.4. Propriétés de l'invariant	32
a- Valeurs propres de l'invariant.....	32
b-Les vecteurs propres de l'invariant.....	34
c-Solution générale.....	36

Chapitre III Solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour le potentiel de Morse

1-Introduction	38
2- Le potentiel de Morse	38
3-La méthode (N-U)	42
4-L'énergie	47
5-La fonction d'onde.....	48

Conclusion générale

Conclusion	51
------------------	----

Références bibliographiques

Références bibliographiques:.....	53
-----------------------------------	----

***Introduction
générale***

Introduction

En mécanique quantique, les phénomènes physiques sont décrits par la fonction d'onde qui contient toutes les informations sur les particules d'un système et son comportement suit l'équation de Schrödinger [1].

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

Il existe plusieurs méthodes trouvées par les physiciens théoriciens pour résoudre l'équation de Schrödinger pour différents systèmes physiques, ces méthodes, soient analytiques ou numériques ; à partir de cette solution, on obtient une fonction d'onde permettant d'identifier le système quantique étudié.

Pour les systèmes stationnaires on sépare les variables (espace-temps) et on obtient ainsi l'équation de Schrödinger stationnaire qui a été résolue analytiquement seulement pour quelques systèmes simples, alors que la plupart des autres cas sont restés sans solutions, ils n'ont pas pu être résolus que par des méthodes approximatives où numériques. Pour les Hamiltoniens dépendants explicitement du temps, c'est-à-dire les systèmes non stationnaires on utilise soit les méthodes exactes ou les méthodes approximatives pour la solution de l'équation de Schrödinger, telles que la méthode d'invariant [2], la méthode de perturbation [3], l'approximation adiabatique, et l'approximation soudaine [3].

Les solutions de l'équation de Schrödinger s'expriment alors comme des fonctions des variables d'espace multipliées par des phases dépendantes du temps.

Dans ce mémoire, on va résoudre l'équation de Schrödinger non stationnaire pour le potentiel de Morse. Ce potentiel est un modèle pratique d'énergie potentielle pour une molécule diatomique [4]. Il représente une meilleure approximation pour la structure vibrationnelle de la molécule que celle de l'oscillateur harmonique quantique car il comprend de manière explicite les effets d'une rupture de liaison, comme l'existence des états non liés. Il prend aussi en compte l'anharmonicité des liaisons réelles et la probabilité non nulle de transition pour les états harmoniques et les bandes de combinaison. Il définit comme:

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

Pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps, on utilise la méthode de séparation des variables et la méthode (N-U) [5], on obtiendra le spectre d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes en termes du polynôme de Laguerre.

Ce mémoire a été structuré comme suit :

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

Au dernier chapitre, on détaille les solutions de l'équation de Schrödinger non stationnaire pour le potentiel de Morse. En fin on termine par une conclusion.

Chapitre I
L'équation de Schrödinger
indépendante du temps

1-introduction

En physique quantique, en vertu de la dualité onde-corpuscule, la particule est décrite par une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ dont nous décrirons la signification et l'équation qui donne son évolution (l'équation de Schrödinger).

L'équation de Schrödinger a été proposée de façon inductive par Erwin Schrödinger en 1925 [6], c'est une équation fondamentale de la mécanique quantique non relativiste. 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, cette équation joue un rôle fondateur en mécanique quantique par analogue à l'équation de Newton en mécanique classique et les équations de Maxwell en électromagnétisme.

2-Construction de l'équation de Schrödinger

Le physicien autrichien Erwin Schrödinger [6] utilisa les résultats de De Broglie pour établir une équation régissant l'évolution spatiale et temporelle de la fonction d'onde d'un système physique.

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

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

où ω : La pulsation et k : vecteur d'onde.

Une particule libre est caractérisée par son énergie E et son impulsion p . La correspondance entre les concepts corpusculaires et ondulatoires est assurée par les deux importantes relations suivantes :

La relation de Planck-Einstein :

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

et la relation de L. De Broglie :

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (1-3)$$

alors:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} \quad (1-4)$$

Lorsqu'on dérive l'onde par rapport au temps, il vient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} E A e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi(\vec{r}, t) \quad (1-5)$$

donc

$$E \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (1-6)$$

d'où :

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (1-7)$$

\hat{E} : est l'opérateur d'énergie.

En dérivant l'onde par rapport au l'espace, il vient

$$\vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t) = \frac{i}{\hbar} \vec{p} A e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} = \frac{i}{\hbar} \vec{p} \Psi(\vec{r}, t) \quad (1-8)$$

où

$$\vec{\nabla} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \quad (1-9)$$

est l'opérateur gradient, alors :

$$\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (1-10)$$

est l'opérateur d'impulsion.

On mécanique classique l'énergie mécanique de particule libre est donné par :

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

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

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

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

où l'impulsion : $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$

d'où

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

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

Donc l'équation de Schrödinger devient :

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

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

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

en utilisant \hat{H} , on peut simplifier l'écriture de l'équation de Schrödinger, on obtient:

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

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

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

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

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

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

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

3- Solution de l'équation de Schrödinger

3.1-Introduction

Il y a deux types de l'équation de Schrödinger : l'équation de Schrödinger indépendante du temps (stationnaire) et l'équation de Schrödinger dépendante du temps (non stationnaire). Dans cette partie, nous allons présenter la solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

3.2-La fonction d'onde

La fonction d'onde c'est un postulat quantique, qui décrit le mouvement des particules quantiques, et donne toutes les informations des états quantiques (par exemple un électron dans l'atome) .En générale la fonction d'onde dépend de l'espace et du temps $\Psi(\vec{r}, t)$.

La fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ doit satisfaire les conditions suivantes:

- Elle doit être continue pour \vec{r} .

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

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

$$\int \Psi^* \Psi d^3r = \int |\Psi|^2 d^3r = 1 \quad (I-20)$$

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

3.3-L'équation de Schrödinger stationnaire

L'équation de Schrödinger s'écrit comme:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (I-21)$$

en générale si le potentiel V est une fonction de \vec{r} uniquement donc l'hamiltonien du système physique ne dépend pas explicitement du temps, alors l'équation de Schrödinger est dit stationnaire, dans ce cas l'énergie totale E est conservée, pour résoudre cette équation on utilise la méthode de séparation des variables, c'est-à-dire que la fonction d'onde peut être réécrite sous la forme d'un produit de deux fonction une temporelle et l'autre spatiale.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) f(t) \quad (I-22)$$

on remplace dans l'équation de Schrödinger, on obtient :

$$\left(i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} \right) \varphi(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) \right) f(t) \quad (I-23)$$

par conséquence :

$$\frac{i\hbar}{f} \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\varphi(\vec{r})} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \right\} \quad (I-24)$$

Comme le membre de gauche de l'équation ne dépend que de t et que le membre de droite ne dépend que de \vec{r} , 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 \vec{r} . Cette constante a la dimension d'une énergie appelons E . alors :

$$\frac{i\hbar}{f} \frac{\partial f}{\partial t} = E \quad (I-25)$$

et par conséquent :

$$f(t) = A e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (I-26)$$

tandis que :

$$\frac{1}{\varphi(\vec{r})} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \right\} = E \quad (I-27)$$

donc :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad (I-28)$$

c'est l'équation de Schrödinger stationnaire, d'où:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \varphi(\vec{r}) \quad (I-29)$$

$\varphi(\vec{r})$: est appelée la solution stationnaire de l'équation de Schrödinger :

$$\Delta \varphi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(\vec{r})) \varphi(\vec{r}) = 0 \quad (I-30)$$

3.3-1-L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension

Si une particule de masse m se déplaçant sur l'axe x , soumise à un potentiel $V(x)$, pour déterminer les niveaux d'énergie, et les fonctions d'ondes associées nous devons résoudre l'équation de Schrödinger unidimensionnelle suivante:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi(x) = E\varphi(x) \quad (I-31)$$

où $-\infty < x < +\infty$.

3.3-2-L'équation de Schrödinger stationnaire à deux dimensions

Dans ce cas le potentiel dépend de deux dimensions, et l'équation de Schrödinger s'écrit comme suit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \right] \varphi(x, y) = E\varphi(x, y) \quad (I-32)$$

3.3-3-L'équation de Schrödinger stationnaire à trois dimensions

Dans ce cas la particule se déplaçant dans un potentiel qui dépend de \vec{r} ($V(\vec{r})$) qui soit central ou non central. Il est préférable d'utiliser les coordonnées sphériques qui sont mieux adaptées à l'opérateur laplacien Δ qui s'écrit :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \quad (I-33)$$

avec :

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (I-34)$$

où L : est l'opérateur du moment cinétique

et $0 < r < +\infty$, et θ, φ sont les angles polaire $0 \leq \theta \leq \pi$ et $0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) + \frac{L^2}{2m r^2} + V(\vec{r}) \quad (I-35)$$

ce qui permet d'écrire l'équation Schrödinger pour un potentiel central $V(r)$ sous la forme :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) + \frac{L^2}{2m r^2} + V(r) \right\} \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (I-36)$$

a) La séparation des variables

L'expression (I-34) montre que toute la dépendance en θ, φ est contenue dans l'opérateur L^2 et on a $[H, L^2] = 0$ et $[H, L_z] = 0$. Les trois observables H, L^2, L_z admettent un système complet de fonctions propre [7] ; de sorte que l'on a

$$H\Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (I-37)$$

$$L^2\Psi(r, \theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (I-38)$$

$$L_z \Psi(r, \theta, \varphi) = m \hbar \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (I-39)$$

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

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (I-40)$$

en utilisant le fait que :

$$\begin{aligned} L^2 \Psi(r, \theta, \varphi) &= L^2 R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \\ &= R(r) L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) \\ &= l(l+1) \hbar^2 R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (I-41)$$

on aboutit à l'équation radiale suivante :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m r^2} + V(r) \right\} R(r) = E R(r) \quad (I-42)$$

où encore

$$\left\{ \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m r^2} \right] \right\} R(r) = 0 \quad (I-43)$$

avec l : est le nombre quantique orbital.

À cause de l'interprétation probabiliste due à M. Born en 1926 [7] des fonctions d'onde, les solutions de l'équation de Schrödinger doivent appartenir à

l'espace de Hilbert. En plus de l'équation de Schrödinger, les solutions de cette dernière doivent vérifier l'équation de continuité suivante:

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad (I-44)$$

avec

$$\rho(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t)^* \psi(\vec{r}, t) \quad (I-45)$$

représente la densité de probabilité et

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}, t)] \quad (I-46)$$

est le vecteur de la densité de courant.

3.4-Quelques méthodes mathématiques de résolution de l'équation de Schrödinger

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

3.4.1-Les méthodes numériques

On peut citer les méthodes suivantes :

- 1) Méthode d'Euler
- 2) Heun

- 3) Euler améliorée
- 4) Runge et Kutta...

3.4.2-Les méthodes analytiques

a)la méthode de perturbation

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

$$H = H_0 + W \quad (I-47)$$

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

H 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 :

$$H = H_0 + \lambda V \quad (I-48)$$

V est de l'ordre de H_0 .

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

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

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

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

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

$$H(\lambda)|\Psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\Psi(\lambda)\rangle \quad (I-49)$$

en remplaçant $H(\lambda)$ par l'expression (I-48) dans l'équation (I-49), il devient:

$$(H_0 + \lambda V)|\Psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\Psi(\lambda)\rangle \quad (I-50)$$

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

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \dots + \lambda^n\varepsilon_n + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \varepsilon_n \quad (I-51)$$

$$|\Psi(\lambda)\rangle = |\Psi^0\rangle + \lambda|\Psi^1\rangle + \dots + \lambda^n|\Psi^n\rangle + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |\Psi^n\rangle \quad (I-52)$$

nous reportons ces développements dans l'équation (I-50) on obtient :

$$(H_0 + \lambda V)(\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |\Psi^n\rangle) = (\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \varepsilon_n)(\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |\Psi^n\rangle) \quad (I-53)$$

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

Pour les termes d'ordre 0 : (λ^0)

$$(H_0 - \varepsilon_0)|\Psi^0\rangle = 0 \quad (I-54)$$

pour les termes d'ordre 1 : (λ^1)

$$(H_0 - \varepsilon_0)|\Psi^1\rangle + (V - \varepsilon_1)|\Psi^0\rangle = 0 \quad (I-55)$$

pour les termes d'ordre 2 : (λ^2)

$$(H_0 - \varepsilon_0)|\Psi^2\rangle + (V - \varepsilon_1)|\Psi^1\rangle - \varepsilon_2|\Psi^0\rangle = 0 \quad (I-56)$$

pour les termes d'ordre n : (λ^n)

$$(H_0 - \varepsilon_0)|\Psi^n\rangle + (V - \varepsilon_{n-1})|\Psi^{n-1}\rangle - \varepsilon_2|\Psi^{n-2}\rangle - \dots - \varepsilon_n|\Psi^0\rangle = 0 \quad (I-57)$$

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

a.2 - La correction d'énergie

On a trouvé la correction à l'énergie d'ordre 1 jusqu' a l'ordre 2 par la projection des équations de perturbation (I-50) sur l'état $|\Psi^0\rangle$ qui donne en tenant compte

$$\langle\Psi^0|\Psi^0\rangle = 1 \quad (I-58)$$

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

$$\varepsilon_1 = \langle\Psi^0|V|\Psi^0\rangle = \langle\varphi_n|V|\varphi_n\rangle \quad (I-59)$$

avec:

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad (I-60)$$

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

$$\varepsilon_2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \varphi_n | V | \varphi_m \rangle|^2}{E_n - E_m} \quad (I-61)$$

a.3-La correction au vecteur propre

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

$$|\Psi^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \varphi_n | V | \varphi_m \rangle|^2}{E_n - E_m} |\varphi_m\rangle \quad (I-62)$$

alors, la correction au 2^{ème} ordre du vecteur propre est donnée par

$$|\Psi^2\rangle = \sum_{p, m \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | V | \varphi_n \rangle}{(E_n - E_p)(E_n - E_m)} |\varphi_p\rangle \quad (I-63)$$

les valeurs propres et les vecteurs propres de l'Hamiltonien perturbé H s'obtiennent en utilisant les développements (I-51) et (I-52). On obtient donc :

$$|\Psi\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \varphi_n | W | \varphi_m \rangle|^2}{E_n - E_m} |\varphi_m\rangle + \dots \quad (I-64)$$

$$E = E_n + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \varphi_n | W | \varphi_m \rangle|^2}{E_n - E_m} |\varphi_m\rangle + \dots \quad (I-65)$$

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 on ne peut pas décomposer l'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 [8].

Dans ce cas, il nécessite de connaître l'énergie de l'état fondamental, donc pour résoudre ce problème on a alors recours à la méthode variationnelle [9], qu'est un outil d'approximation simple mais très utile dans de nombreux problèmes de physique quantique ou il est très difficile à connaître la solution exacte. Elle est basée sur des étapes mathématiques que nous allons résumés comme suit [10].

b.1- Principe de la méthode

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

Donc on a:

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad (I-66)$$

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

$$|\Psi\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n | \Psi \rangle \quad (I-67)$$

et : $E_0 \leq E$.

la valeur moyenne de l'énergie du système dans l'état $|\Psi\rangle$ est donnée par :

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (I-68)$$

si on remplace $|\Psi\rangle$ par son expression nous obtenons :

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_n E_n |\langle \varphi_n | \Psi \rangle|^2 \geq E_0 \sum_n |\langle \varphi_n | \Psi \rangle|^2 = E_0 \langle \varphi_n | \Psi \rangle \quad (I-69)$$

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

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_0 \quad (I-70)$$

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

Chapitre II
L'équation de Schrödinger
dépendante du temps

1-Introduction

Dans cette partie nous avons donné quelques méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Différentes méthodes existent pour résoudre l'équation de Schrödinger non stationnaire. Le choix d'une méthode particulière repose généralement sur la forme du potentiel et sur celle de la fonction d'onde recherchée. En pratique, il existe plusieurs techniques de résolutions. Le but est de trouver la solution $|\Psi(t)\rangle$ correspondant à la condition initiale $|\Psi(t_0)\rangle$.

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

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

2.1- Méthodes approximatives

Parfois, lorsqu'on ne peut pas trouver des résultats exacts, on fait appel aux méthodes d'approximation, ces méthodes sont généralement très puissantes et applicables à de nombreux systèmes physiques, elles sont beaucoup plus utilisées dans les domaines de la physique appliquée ; telles que la physique du solide, physique des plasmas, l'information quantique...etc [11]. Parmi ces méthodes on peut citer :

2.1.1- La théorie de perturbation

la théorie des perturbations est très importante et souvent utilisée pour fournir des solutions approximatives aux problèmes qui sont trop compliqués pour admettre des solutions analytiques.

L'idée essentielle de la théorie des perturbations 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'Hamiltonien du système s'écrit :

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

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

Il est montré que l'opérateur d'évolution vérifie l'équation suivante:

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

avec : $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$, et $U^{(0)}(t, t_0)$ est la solution de l'équation non perturbée.

avec la condition initiale : $U^{(0)}(t, t_0) = 1$ et les $U^{(n)}(t, t_0), \forall n \geq 1$ sont donnés par :

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

la théorie des perturbations dépendante du temps permet donc de calculer approximativement les fonctions d'ondes à partir des états stationnaires du système non perturbé [12], et les différentes grandeurs physiques sont obtenues en calculant les valeurs moyennes des opérateurs correspondants.

2-1-2 –La méthode variationnelle

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

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

est stationnaire si elle avoisine l'une de ces valeurs propres. Alors, pour trouver les valeurs propres de l'Hamiltonien on choisit une fonction d'essai appropriée dépendante d'un certain paramètre, 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 [3].

2.1.3- L'approximation soudaine

Supposant que le système est soumis à un champ extérieur pendant un intervalle de temps T , on appelle approximation soudaine, l'approximation appliquée dans le cas limite $T \rightarrow 0$, elle s'énonce comme suit [13,14] :

« ... A la limite où $T \rightarrow 0$, c'est-à-dire dans le cas du passage infiniment rapide, l'état dynamique du système reste inchangé ... ».

$$\lim_{T \rightarrow 0} U(T + t_0, t_0) = 1 \quad (\text{II -5})$$

2.1.4-L'approximation adiabatique

Dans l'autre cas extrême où l'hamiltonien du système varie lentement avec le temps, c'est-à-dire $T \rightarrow \infty$; on parle de l'une des méthodes les plus puissantes en mécanique quantique : l'approximation adiabatique. Parmi l'une des résultats de ces applications dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps : la phase de Berry où phase géométrique. À travers ce dernier on peut donner aux lecteurs une interprétation sur le rôle de l'approximation adiabatique dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps [3].

2.2 -Méthodes exactes

2.2.1.Transformations unitaires

Il est important de se rappeler que pour décrire l'évolution du vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ dans l'espace de Hilbert, on doit choisir un système d'axes ou un référentiel. Le choix de référentiel n'a pas de raison d'être unique, c'est-à-dire que l'on est libre de passer à un autre système d'axes. Chaque fois que l'on change de référentiel, on change de point de vue et par conséquent on observe le système physique sous un angle différent. En pratique, pour passer d'un référentiel à un autre, on utilise des opérateurs unitaires U qui peuvent être indépendants ou dépendants du temps et qui satisfont à la condition [3] :

$$UU^+ = U^+U = 1 \quad (II-6)$$

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

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = U^{-1}|\Psi(t)\rangle \quad (II-7)$$

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

$$|\tilde{H}(t)\rangle = U(t)^{-1}H(t)U(t) - i\hbar U(t)^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U(t) \quad (II-8)$$

donc les transformations unitaires servent d'outils de recherche de nouvelles représentations. Par exemple, dans le nouveau référentiel, on aimerait être capable d'effectuer une séparation de variables entre la partie temporelle et la partie spatiale du vecteur d'état $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$. En d'autres termes, on cherche des opérateurs unitaires qui mettraient l'hamiltonien original $H(t)$ sous une forme factorisable, i.e. $\tilde{H}(t) = \sum_n h_n T_n$ ou $\tilde{H}(t) = g(t)k$, ou 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 donné aussi des transformations unitaires pour obtenir le nouveau référentiel dépendant du temps [3].

2.2.2- Opérateur d'évolution

Du fait de la correspondance linéaire entre $|\Psi(t_0)\rangle$ et $|\Psi(t)\rangle$, il existe un opérateur linéaire $U(t, t_0)$ tel que [3]:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle \quad (\text{II-9})$$

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

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t, t_0)} \quad (\text{II-10})$$

effectivement, en prenant la dérivée partielle par rapport au temps de la fonction (II-10) on obtient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = HU(t, t_0) \quad (\text{II-11})$$

on note que l'équation (II-11) 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 :

$$U(t, t_0) = U(t, t_k)U(t_k, t_{k-1}) \dots \dots U(t_2, t_1) U(t_1, t_0) \quad (\text{II-12})$$

on peut choisir t_0, t_1, \dots, t_k de telle sorte que les intervalles entre eux soient égaux. Donc $U(t_1, t_0)$ peut s'écrire :

$$U(t_1, t_0) = \prod_{i=0}^N U_i(t_i, t_i - \Delta t) \quad (\text{II-13})$$

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

Un cas particulier de la transformation (II-10), ayant de multiples applications dans la théorie de diffusion des particules, est celui où l'état initial est fixé non pas pour $t_0 = 0$; mais pour $t_0 = -\infty$; et l'état final $|\Psi(t)\rangle$ est considéré pour $t = +\infty$, l'éq. (II-13) s'écrit alors

$$|\Psi(+\infty)\rangle = U(-\infty, +\infty)|\Psi(-\infty)\rangle \quad (\text{II-14})$$

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

$$U = U(-\infty, +\infty) = \lim_{t_0 \rightarrow -\infty, t \rightarrow +\infty} U(t, t_0) \quad (\text{II-15})$$

Cet opérateur porte le nom de matrice de diffusion.

2.2.3. Changement de représentation

Jusqu'à présent un mode de description a été généralement employé ; il s'agissait de la description de Schrödinger. En réalité, elle n'est pas la seule représentation possible. En fait, il n'est pas toujours nécessaire de trouver la solution de l'équation de Schrödinger qui contient souvent trop d'informations par rapport aux questions que l'on se pose et alors, l'intégration explicite de l'équation (II-11) [3] :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0) \quad (\text{II-16})$$

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 d'interaction.

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = [A_H(t), H(t)] + i\hbar \left(\frac{d}{dt} A_S(t) \right)_H \quad (\text{II-17})$$

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

2.2.4. La théorie des invariants

2.2.4.1 Introduction

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

2.2.4. 2.Représentation de la théorie des invariants

La théorie des invariants pour des Hamiltoniens Hermitiens a été introduite par Lewis et Riesenfeld (1969) [2], où ils ont dérivé une simple relation entre les vecteurs propre de l'invariant et la solution de l'équation de Schrödinger.

La théorie des invariants représente l'un des piliers fondamentaux dans l'étude des systèmes dépendants du temps, cette importance de la théorie des invariants relie au langage mathématique puissant qui la caractérise, et sur sa souplesse dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps, dans cette partie de notre travail, on donne quelques notions essentielles concernant la théorie des invariants.

2.2.4.3. Les invariants

On considère l'équation de Schrödinger suivante :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle \quad (\text{II-18})$$

où H est l'Hamiltonien du système.

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

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

$$I^\dagger(t) = I(t) \quad (\text{II-20})$$

en appliquant l'équation (II-19) sur $|\Psi(t)\rangle$ et en utilisant l'équation (II-18), nous obtenons :

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\Psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} [I, H] |\Psi(t)\rangle = 0 \quad (\text{II-21})$$

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\Psi(t)\rangle + IH(t)|\Psi(t)\rangle - H(t)I|\Psi(t)\rangle = 0 \quad (\text{II-22})$$

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\Psi(t)\rangle + I i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle - H(t)I|\Psi(t)\rangle = 0 \quad (\text{II-23})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (I|\Psi(t)\rangle) = H(t)I|\Psi(t)\rangle \quad (\text{II-24})$$

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

2.2.4.4. Propriétés de l'invariant

a-Valeurs propres de l'invariant

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

$$I(t)|\varphi_\lambda(\vec{r}, t)\rangle = \lambda|\varphi_\lambda(\vec{r}, t)\rangle \quad (\text{II-25})$$

on démontre dans la suite que λ : est une constante.

Avec le produit Hermitien sur l'espace des états :

$$\langle \varphi_\lambda | \varphi_{\lambda'} \rangle = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (\text{II-26})$$

en dérivant l'équation (II- 25) par rapport au temps, on obtient :

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

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

on applique l'équation (II-19) sur les états propres : $|\varphi_\lambda\rangle$

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_\lambda\rangle + \frac{1}{i\hbar} [I, H] |\varphi_\lambda\rangle = 0 \quad (\text{II-29})$$

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

le produit scalaire de l'équation (II-30) par $\langle \varphi_{\lambda'} |$ donne :

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

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda'} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_\lambda \rangle + \lambda' \langle \varphi_{\lambda'} | H | \varphi_\lambda \rangle - \lambda \langle \varphi_{\lambda'} | H | \varphi_\lambda \rangle = 0 \quad (\text{II-32})$$

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda'} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_\lambda \rangle + (\lambda' - \lambda) \langle \varphi_{\lambda'} | H | \varphi_\lambda \rangle = 0 \quad (\text{II-33})$$

pour : $\lambda' = \lambda$

$$\langle \varphi_\lambda | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_\lambda \rangle = 0 \quad (\text{II-34})$$

en prenant le produit scalaire de l'équation (II-28) avec l'état propre $\langle \varphi_\lambda |$, on obtient :

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

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

$$\langle \varphi_\lambda | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_\lambda \rangle = \langle \varphi_\lambda | \frac{\partial \lambda}{\partial t} | \varphi_\lambda \rangle \quad (\text{II-37})$$

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

on a :

$$\langle \varphi_\lambda | \varphi_\lambda \rangle = \delta_{\lambda\lambda} = 1 \quad (\text{II-39})$$

alors :

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

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \left\langle \varphi_\lambda \left| \frac{\partial I}{\partial t} \right| \varphi_\lambda \right\rangle = 0 \quad (\text{II-41})$$

donc λ : est une constante.

b-Les vecteurs propres de l'invariant

Pour trouver le rapport entre les vecteurs propres et la solution de l'équation de Schrödinger, on écrit d'abord l'équation du mouvement de $|\varphi_\lambda\rangle$. En commençant par l'équation (II-28) et en utilisant l'équation (II-41), on obtient :

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

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_\lambda\rangle + I \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_\lambda\rangle = \lambda \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_\lambda\rangle \quad (\text{II-43})$$

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_\lambda\rangle = (\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_\lambda\rangle \quad (\text{II-44})$$

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

$$\left\langle \varphi_{\lambda'} \left| \frac{\partial I}{\partial t} \right| \varphi_\lambda \right\rangle = \left\langle \varphi_{\lambda'} \left| (\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} \right| \varphi_\lambda \right\rangle \quad (\text{II-45})$$

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

on déduit que :

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda'} | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda} \rangle + (\lambda - \lambda') \langle \varphi_{\lambda'} | H | \varphi_{\lambda} \rangle = 0 \quad (\text{II-47})$$

donc :

$$i\hbar(\lambda - \lambda') \langle \varphi_{\lambda'} | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda} \rangle = (\lambda - \lambda') \langle \varphi_{\lambda'} | H | \varphi_{\lambda} \rangle \quad (\text{II-48})$$

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

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda'} | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda} \rangle = \langle \varphi_{\lambda'} | H | \varphi_{\lambda} \rangle \quad (\text{II-49})$$

si l'équation (II-48) est valable pour $\lambda = \lambda'$ aussi bien que $\lambda \neq \lambda'$, alors on déduit immédiatement que $|\varphi_{\lambda}\rangle$ satisfait l'équation de Schrödinger, c'est-à-dire, $|\varphi_{\lambda}\rangle$ est une solution particulière de l'équation de Schrödinger.

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

$$|\varphi_{\lambda}\rangle_{\alpha} = e^{i\alpha_{\lambda}(t)} |\varphi_{\lambda}\rangle \quad (\text{II-50})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda}\rangle_{\alpha} = H |\varphi_{\lambda}\rangle_{\alpha} \quad (\text{II-51})$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{i\alpha_{\lambda}(t)} |\varphi_{\lambda}\rangle) = H (e^{i\alpha_{\lambda}(t)} |\varphi_{\lambda}\rangle) \quad (\text{II-52})$$

$$i\hbar \frac{\partial e^{i\alpha_\lambda(t)}}{\partial t} |\varphi_\lambda\rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_\lambda\rangle e^{i\alpha_\lambda(t)} = H(e^{i\alpha_\lambda(t)} |\varphi_\lambda\rangle) \quad (\text{II-53})$$

$$-\hbar \frac{\partial \alpha_\lambda(t)}{\partial t} |\varphi_\lambda\rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_\lambda\rangle = H|\varphi_\lambda\rangle \quad (\text{II-54})$$

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

$$-\hbar \frac{\partial \alpha_\lambda}{\partial t} \langle \varphi_{\lambda'} | \varphi_\lambda \rangle + \langle \varphi_{\lambda'} | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_\lambda \rangle = \langle \varphi_{\lambda'} | H | \varphi_\lambda \rangle \quad (\text{II-55})$$

$$\hbar \frac{d\alpha_\lambda}{dt} \langle \varphi_{\lambda'} | \varphi_\lambda \rangle = \langle \varphi_{\lambda'} | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] | \varphi_\lambda \rangle \quad (\text{II-56})$$

$$\hbar \frac{d\alpha_\lambda}{dt} \delta_{\lambda\lambda} = \langle \varphi_{\lambda'} | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] | \varphi_\lambda \rangle \quad (\text{II-57})$$

donc on obtient :

$$\hbar \frac{d\alpha_\lambda}{dt} = \langle \varphi_\lambda | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] | \varphi_\lambda \rangle \quad (\text{II-58})$$

c-Solution générale

La solution générale de l'équation de Schrödinger est les états propres de l'invariant multiplié par un facteur de phase dépendant du temps :

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{i\alpha_\lambda(t)} \varphi_\lambda(\vec{r}, t) \quad (\text{II-59})$$

Chapitre III
***La solution de l'équation de
Schrödinger dépendante du
temps pour le potentiel de
Morse***

1-Introduction

Plusieurs auteurs ont étudié les systèmes dépendants du temps pour différents potentiels [2,15-24]. Parmi ces potentiels non stationnaires qui sont rarement étudiés le potentiel de Morse. Ce potentiel est nommé d'après le physicien Philip Morse, c'est un modèle pratique d'énergie potentielle pour une molécule diatomique [4]. Il représente une meilleure approximation pour la structure vibrationnelle de la molécule que celle de l'oscillateur harmonique quantique car il comprend de manière explicite les effets d'une rupture de liaison, comme l'existence des états non liés. Il prend aussi en compte l'anharmonicité des liaisons réelles et la probabilité non nulle de transition pour les états harmoniques et les bandes de combinaison.

2- Le potentiel de Morse

Dans ce chapitre, nous essayerons d'obtenir la solution de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle pour le potentiel de Morse dépendant du temps. La forme générale de ce potentiel est défini par :

$$V(x) = V_1(t)e^{-2ax} - V_2(t)e^{-ax} \quad (\text{III-1})$$

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

$$H(x,t) = \frac{p^2}{2m(t)} + V_1(t)e^{-2ax} - V_2(t)e^{-ax} \quad (\text{III-2})$$

où $m(t), V_1(t), V_2(t)$ sont des paramètres dépendants du temps et a est une constante.

Comme une application nous avons choisit :

$$m(t) = m_0 e^{-\mu t} \quad (\text{III-3})$$

$$V_1(t) = V_{1_0} e^{\mu t} \quad (\text{III-4})$$

$$V_2(t) = V_{2_0} e^{\mu t} \quad (\text{III-5})$$

où m_0, V_{1_0}, V_{2_0} et μ sont des constantes.

En remplaçant $m(t), V_1$ et V_2 par leurs expressions dans l'équation (III-2), il devient :

$$H(x, t) = \frac{p^2}{2m_0 e^{-\mu t}} + V_{1_0} e^{\mu t} e^{-2ax} - V_{2_0} e^{\mu t} e^{-ax} \quad (\text{III-6})$$

en outre :

$$H(x, t) = \frac{1}{2m_0 e^{-\mu t}} (p^2 + 2V_{1_0} m_0 e^{-2ax} - 2V_{2_0} m_0 e^{-ax}) \quad (\text{III-7})$$

alors :

$$H(x, t) = \frac{1}{2m(t)} (p^2 + \gamma_1 e^{-2ax} - \gamma_2 e^{-ax}) \quad (\text{III-8})$$

avec

$$\gamma_1 = 2V_{1_0} m_0 \quad (\text{III-9})$$

$$\gamma_2 = 2V_{2_0} m_0 \quad (\text{III-10})$$

γ_1 et γ_2 sont des constantes.

L'équation de Schrödinger dépendante du temps est :

$$H\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (\text{III-11})$$

notre système évolue dans le temps comme suit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \frac{1}{2m(t)} [p^2 + \gamma_1 e^{-2ax} - \gamma_2 e^{-ax}] \Psi(x, t) \quad (\text{III-12})$$

pour résoudre cette équation, on pose :

$$s = \int \frac{1}{2m(t)} dt \quad (\text{III-13})$$

par conséquent:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{2m(t)} \frac{\partial}{\partial s} \quad (\text{III-14})$$

alors :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \Psi(x, s) = [p^2 + \gamma_1 e^{-2ax} - \gamma_2 e^{-ax}] \Psi(x, s) \quad (\text{III-15})$$

dans ce cas on peut utiliser la méthode de séparation des variables, on pose :

$$\Psi(x, s) = \Phi(x) f(s) \quad (\text{III-16})$$

on obtient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} (\Phi(x) f(s)) = [p^2 + \gamma_1 e^{-2ax} - \gamma_2 e^{-ax}] (\Phi(x) f(s)) \quad (\text{III-17})$$

en divisant l'équation (III-17) par $\Phi(x) f(s)$, on aboutit à

$$\frac{i\hbar}{f(s)} \frac{\partial f(s)}{\partial s} = \frac{1}{\Phi(x)} H_0 \Phi(x) = \varepsilon_n = \text{constant} \quad (\text{III-18})$$

on obtient les deux équations différentielles suivantes:

$$H_0 \Phi(x) = \varepsilon_n \Phi(x) \quad (\text{III-19})$$

et

$$\frac{i\hbar}{f(s)} \frac{\partial f(s)}{\partial s} = \varepsilon_n \quad (\text{III-20})$$

avec:

$$H_0 = p^2 + \gamma_1 e^{-2ax} - \gamma_2 e^{-ax} \quad (\text{III-21})$$

la solution de l'équation (III-20) est :

$$f(s) = C_n e^{\frac{-i\varepsilon_n s}{\hbar}} \quad (\text{III-22})$$

où C_n : est la constante de normalisation.

En remplaçant s par l'expression (III-13) dans l'équation (III-22), il devient :

$$f(s) = C_n e^{\frac{-i[e^{\mu t} - 1]\varepsilon_n}{2\mu m_0 \hbar}} \quad (\text{III-23})$$

maintenant, on cherche la solution de l'équation (III-19) :

$$(p^2 + \gamma_1 e^{-2ax} - \gamma_2 e^{-ax})\Phi(x) = \varepsilon_n \Phi(x) \quad (\text{III-24})$$

qui se transforme à l'équation différentielle suivante :

$$\Phi''(x) + \frac{1}{\hbar^2}(\varepsilon_n - \gamma_1 e^{-2ax} + \gamma_2 e^{-ax})\Phi(x) = 0 \quad (\text{III-25})$$

pour résoudre cette équation différentielle on fait le changement de variable suivant :

$$z = \sqrt{\gamma_1} e^{-ax} \quad (\text{III-26})$$

d'où

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \right) = \left(-az \frac{d}{dz} \right) \left(-az \frac{d}{dz} \right) = a^2 z \frac{d}{dz} + a^2 z^2 \frac{d^2}{dz^2} \quad (\text{III-27})$$

on obtient :

$$\left[a^2 z^2 \frac{d^2}{dz^2} + a^2 z \frac{d}{dz} + \frac{1}{\hbar^2} \left(\varepsilon_n - z^2 + \frac{\gamma_2}{\sqrt{\gamma_1}} z \right) \right] \Phi(z) = 0 \quad (\text{III-28})$$

donc :

$$\Phi''_n(z) + \frac{1}{z} \Phi'_n(z) + \frac{1}{z^2} \left[-\frac{z^2}{a^2 \hbar^2} + \frac{\gamma_2}{a^2 \hbar^2 \sqrt{\gamma_1}} z + \frac{\varepsilon_n}{a^2 \hbar^2} \right] \Phi_n(z) = 0 \quad (\text{III-29})$$

Pour résoudre cette équation on utilise la méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U) [5].

3-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 [5]:

$$\psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\psi(s) = 0 \quad (\text{III-30})$$

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

$$\psi(s) = \emptyset(s)y(s) \quad (\text{III-31})$$

l'éq. (III-30) devienne :

$$\sigma(s)y''(s) + \tau(s)y'(s) + \nu y(s) = 0 \quad (\text{III-32})$$

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

$$\frac{\emptyset'(s)}{\emptyset(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \quad (\text{III-33})$$

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

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s)\rho(s)] \quad (\text{III-34})$$

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

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho \quad (\text{III-35})$$

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

$$\pi(s) = \frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma} - k\sigma} \quad (\text{III-36})$$

$$\nu = k + \pi' \quad (\text{III-37})$$

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

$$\nu = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma'' \quad (\text{III-38})$$

où

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) \quad (\text{III-39})$$

et son dérivé est négatif.

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

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1 - \alpha_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{s^2(1 - \alpha_3 s)^2} \right] \psi = 0 \quad (\text{III-40})$$

nous comparons l'éq. (III-40) avec l'éq. (III-29) de notre système, on trouve :

$$\begin{cases} \xi_1 = \frac{1}{a^2 \hbar^2} \\ \xi_2 = \frac{\gamma_2}{a \hbar^2 \sqrt{\gamma_1}} \\ \xi_3 = \frac{-\varepsilon_n}{a^2 \hbar^2} \end{cases} \quad (\text{III-41})$$

et :

$$\begin{cases} \alpha_1 = 1 \\ \alpha_2 = 0 \\ \alpha_3 = 0 \end{cases} \quad (\text{III-42})$$

nous pouvons résoudre ceci comme suit. Lorsque l'éq. (III-40) est comparée avec l'éq. (III-30), nous obtenons

$$\tilde{t} = \alpha_1 - \alpha_2 s \quad (\text{III-43})$$

Et

$$\sigma = s(1 - \alpha_3 s) \quad (\text{III-44})$$

et aussi

$$\tilde{\sigma} = -\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3 \quad (\text{III-45})$$

en substituent ceux-ci dans l'éq. (III-36), on obtient

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5 s \pm \sqrt{(\alpha_6 - k\alpha_3)s^2 + (\alpha_7 + k)s + \alpha_8} \quad (\text{III-46})$$

où

$$\alpha_4 = \frac{1}{2}(1 - \alpha_1) \quad (\text{III-47})$$

$$\alpha_5 = \frac{1}{2}(\alpha_2 - 2\alpha_3) \quad (\text{III-48})$$

$$\alpha_6 = \alpha_5^2 + \xi_1 \quad (\text{III-49})$$

$$\alpha_7 = 2\alpha_4\alpha_5 - \xi_2 \quad (\text{III-50})$$

$$\alpha_8 = \alpha_4^2 + \xi_3 \quad (\text{III-51})$$

dans l'éq. (III-46), la fonction sous la racine carrée doit être le carré d'un polynôme conformément à la méthode de (N-U), de telle sorte que

$$k_{1,2} = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) \mp 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \quad (\text{III-52})$$

où, nous définissons

$$\alpha_9 = \alpha_3\alpha_7 + \alpha_3^2\alpha_8 + \alpha_6 \quad (\text{III-53})$$

pour chaque K les fonctions π sont obtenues. Pour

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) - 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \quad (\text{III-54})$$

π devienne

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5 s - \left[\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) s - \sqrt{\alpha_8} \right] \quad (\text{III-55})$$

pour le même K , pour éqs. (III-39), (III-43) et (III-46)

$$\tau = \alpha_1 + 2\alpha_4 - (\alpha_2 - 2\alpha_5)s - 2\left[(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8})s - \sqrt{\alpha_8} \right] \quad (\text{III-56})$$

et

$$\tau' = -(\alpha_2 - 2\alpha_5) - 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) = -2\alpha_3 - 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) < 0 \quad (\text{III-57})$$

sont obtenues. Quant l'éq. (III-37) est utilisée avec l'éq. (III-38) et l'éq. (III-57) l'équation suivante est dérivée:

$$\alpha_2 n - (2n + 1)\alpha_5 + (2n + 1)(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) + n(n - 1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} = 0 \quad (\text{III-58})$$

cette équation donne le spectre de l'énergie pour le problème donné. Pour l'éq. (III-35)

$$\rho(s) = s^{\alpha_{10}-1} (1 - \alpha_3 s)^{\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1} \quad (\text{III-59})$$

est trouvé et lorsque cette équation est utilisée dans l'éq. (III-34)

$$y_n = P_n^{(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1)} (1 - 2\alpha_3 s) \quad (\text{III-60})$$

est obtenue, où,

$$\alpha_{10} = \alpha_1 + 2\alpha_4 + 2\sqrt{\alpha_8} \quad (\text{III-61})$$

Et

$$\alpha_{11} = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) \quad (\text{III-62})$$

et $P_n^{(\alpha, \beta)}$ sont les polynômes de Jacobi. Utilisant l'éq. (III-33),

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

est obtenue et la solution générale devienne

$$\psi = \phi(s)y(s) \quad (\text{III-64})$$

$$\psi = s^{\alpha_{12}} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_8}} P_n^{(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_8} - \alpha_{10}-1)} (1 - 2\alpha_3 s) \quad (\text{III-65})$$

ici, les fonctions alpha sont données par :

$$\alpha_{12} = \alpha_4 + \sqrt{\alpha_8} \quad (\text{III-66})$$

et

$$\alpha_{13} = \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \quad (\text{III-67})$$

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

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} P_n^{(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_8} - \alpha_{10}-1)} (1 - 2\alpha_3 s) = L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11} s) \quad (\text{III-68})$$

et

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_8}} = e^{\alpha_{13} s} \quad (\text{III-69})$$

La solution donnée dans l'éq. (III-65) devienne

$$\psi = s^{\alpha_{12}} e^{\alpha_{13} s} L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11} s) \quad (\text{III-70})$$

dans certains cas, on est besoin d'une deuxième solution de l'éq. (III-46). Dans ce cas, si la même procédure est suivie on utilisant

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8) + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} \quad (\text{III-71})$$

cette solution devienne

$$\psi = s^{\alpha_{12}^*} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12}^* - \frac{\alpha_{13}^*}{\alpha_5}} P_n^{\left(\alpha_{10}^* - 1, \frac{\alpha_{11}^*}{\alpha_5} - \alpha_{10}^* - 1\right)} (1 - 2\alpha_3 s) \quad (\text{III-72})$$

est le spectre d'énergie est

$$\alpha_2 n - 2n\alpha_5 + (2n + 1)(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) + n(n - 1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} + \alpha_5 = 0 \quad (\text{III-73})$$

les paramètres prédéfinis alpha étoile sont les suivants :

$$\alpha_{10}^* = \alpha_1 + 2\alpha_4 - 2\sqrt{\alpha_8} \quad (\text{III-74})$$

$$\alpha_{11}^* = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) \quad (\text{III-75})$$

$$\alpha_{12}^* = \alpha_4 - \sqrt{\alpha_8} \quad (\text{III-76})$$

$$\alpha_{13}^* = \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) \quad (\text{III-77})$$

ceux-ci nous permet de calculer les paramètres α_i de notre système :

$$\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 0, \alpha_3 = 0, \alpha_4 = 0, \alpha_5 = 0, \alpha_6 = \frac{1}{a\hbar^2}, \alpha_7 = \frac{-\gamma_2}{a\hbar^2\sqrt{\gamma_1}}, \alpha_8 = \frac{-\varepsilon_n}{a^2\hbar^2}, \alpha_9 = \frac{1}{a^2\hbar^2}, \alpha_{10} = 1 + \frac{2}{a\hbar}\sqrt{-\varepsilon_n}, \alpha_{11} = \frac{2}{a\hbar}, \alpha_{12} = \frac{1}{a\hbar}\sqrt{-\varepsilon_n}, \alpha_{13} = -\frac{1}{a\hbar} \quad (\text{III-78})$$

4-L'énergie

Les valeurs propres de la fonction $\Phi(x)$ sont :

$$\varepsilon_n = \frac{-a^2 \hbar^2}{4} \left[(2n + 1) - \frac{\gamma_2}{\hbar a \sqrt{\gamma_1}} \right]^2 \quad (\text{III-79})$$

pour obtenir le spectre d'énergie , on utilise la formule suivante :

$$E(t) = \frac{1}{2m(t)} \varepsilon_n \quad (\text{III-80})$$

donc :

$$E(t) = -\frac{a^2 \hbar^2}{8m_0 e^{-\mu t}} \left[(2n + 1) - \frac{\gamma_2}{\hbar a \sqrt{\gamma_1}} \right]^2 \quad (\text{III-81})$$

la solution de l'équation (III-29) est :

$$\Phi_n(x) = (\sqrt{\gamma_1} e^{-ax})^{\frac{\sqrt{-\varepsilon_n}}{\hbar a}} e^{-\frac{1}{\hbar a} \sqrt{\gamma_1} e^{-ax}} L_n^{\frac{2\sqrt{-\varepsilon_n}}{\hbar a}} \left(\frac{2}{\hbar a} \sqrt{\gamma_1} e^{-ax} \right) \quad (\text{III-82})$$

5-La fonction d'onde

La fonction propre de notre système est donnée par :

$$\Psi(x, t) = C_n e^{\frac{-i[e^{\mu t} - 1] \varepsilon_n}{2\mu m_0 \hbar}} (\sqrt{\gamma_1} e^{-ax})^{\frac{\sqrt{-\varepsilon_n}}{\hbar a}} e^{-\frac{1}{\hbar a} \sqrt{\gamma_1} e^{-ax}} L_n^{\frac{2\sqrt{-\varepsilon_n}}{\hbar a}} \left(\frac{2}{\hbar a} \sqrt{\gamma_1} e^{-ax} \right) \quad (\text{III-83})$$

où $L_n^\beta(x)$ est le polynôme de Laguerre et C_n est la constante de normalisation.

C_n est déterminée par la condition :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (\text{III-84})$$

on trouve :

$$C_n = \sqrt{\frac{\frac{2}{\hbar} \left(\frac{2}{\hbar a} \right)^{\beta-1}}{\sum_{m=0}^n \sum_{m'=0}^{n-m} \frac{(-1)^{m+m'} [(n+\beta)!]^2}{(n-m)! (n-m')! (\beta+m)! (\beta+m')! m! m'!} \Gamma(\beta+m+m')}} \quad (\text{III-85})$$

$$\text{où } \beta = 2n + 1 - \frac{\gamma_2}{\hbar\alpha\sqrt{\gamma_1}} .$$

Nous avons utilisé la propriété de polynômes de Laguerre suivante:

$$\int_0^{+\infty} Z^{\beta-1} e^{-z} \left(L_n^\beta(Z) \right)^2 dz = \sum_{m=0}^n \sum_{m'=0}^n \frac{(-1)^{m+m'} [(n+\beta)!]^2}{(n-m)! (n-m)! (\beta+m)! (\beta+m)! m! m'} \Gamma(\beta + m + m')$$

(III-86)

avec :

$$L_n^\beta(Z) = \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m (n+\beta)!}{m! (\beta+m)! (n-m)!} Z^m \quad \text{(III-87)}$$

où $\Gamma(x)$: est la fonction gamma.

On remarque que la fonction d'onde obtenue pour notre système contient une phase dépendante du temps qui est donnée par:

$$\frac{\hbar\alpha^2}{8\mu m_0} \left[(2n + 1) - \frac{\gamma_2}{\hbar\alpha\sqrt{\gamma_1}} \right]^2 [e^{\mu t} - 1].$$

Cette phase représente la phase dynamique, donc la phase de Berry est nulle.

***Conclusion
générale***

Conclusion

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

Dans ce mémoire, on a résolu l'équation de Schrödinger unidimensionnelle pour le potentiel de Morse non stationnaire. Ce potentiel est un modèle pratique d'énergie potentielle pour une molécule diatomique. Il représente une meilleure approximation pour la structure vibrationnelle de la molécule que celle de l'oscillateur harmonique quantique car il comprend de manière explicite les effets d'une rupture de liaison, comme l'existence des états non liés. Il prend aussi en compte l'anharmonicité des liaisons réelles et la probabilité non nulle de transition pour les états harmoniques et les bandes de combinaison. Pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps, on a utilisé la méthode de séparation de variables et la méthode (N-U) pour réduire l'équation différentielle du deuxième degré à une équation différentielle de type hypergéométrique. Enfin, on obtiendra le spectre d'énergie et la forme finale des fonctions d'onde en termes du polynôme de Laguerre.

***Références
bibliographiques***

Références bibliographiques:

- [1] G. Beylkin: On the representation of operators in bases of compactly supported wavelets", SIAM J. Numer. Anal, 6 (1992) 1716.
- [2] LewisHR Jr and RiesenfeldWB , An exact quantum theory of the time-dependent harmonic oscillator and of a charged particle in a time-dependent electromagnetic field J. Math Phys. 10 (1969) 1458
- [3] S. Menouar, Thèse de Doctorat ès Sciences, (Université de Sétif, 2009).
- [4] P.M. Morse, Phys. Rev.34 (1929)57.
- [5] Tezcan. C. ,Sever. R, Int. J Theor Phys. 48 (2009) 337 .
- [6] E. Schrödinger, "The non relativistic équation of the de Broglie waves," Ann. Physik 79(1926)361.
- [7] L. Landau et E. Lifchitz, mécanique quantique, edition mir 1975.
- [8]Boucheriha.H.'Introduction à la physique quantique'.Centre de publication universitaire : Tunis.(2002).
- [9] A.Messiah,Mécanique Quantique T1(Dunod,Paris,1995) nouvelle édition.
- [10] - Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics, Vol 1, 2 .
- [11] L. Krache, Thèse de Doctorat, (Université de Sétif, 2010).
- [12] A.M. Markov, Invariant and the Evolution of Nonstationary Quantum Systems, (New York, 1989).
- [13] A. Messiah, "mécanique quantique", édition Dunod. (Paris, 1995).
- [14] D. J. Grlffiths – Introduction to Quantum Mechanics – Prentice Hall, Inc. Toronto (1995).
- [15] M. Maamache: Phys. Rev. A 52 (1995) 936.
- [16] M. Maamache and H. Bekkar: J. Phys. A 36 (2003) L359.
- [17] M. Maamache, S. Menouar, and L. Krache: Int. J. Theor. Phys. 45 (2006) 2191.
- [18] S. Menouar, M. Maamache, Y. Saadi, and J. R. Choi: J. Phys. A 41 (2008) 215303.
- [19] S. Medjber, H. Bekkar and B. Taleb, Wave Functions for Time-Dependent Morse Potential, Journal of Mathematics and System Science 4 (2014) 763.
- [20] S.Medjber, H.Bekkar, S.Menouar, and J R Choi, Quantization of a 3D Non stationary Harmonic plus an Inverse Harmonic Potential System, Advances in Mathematical Physics 2016.

- [21] Menouar S and Choi J R , Quantization of time-dependent singular potential systems: non-central potential in three dimensions AIP Adv. 6 (2016)095110.
- [22] Menouar S and Choi J R , Quantization of time-dependent non-central singular potential systems in three dimensions by using the Nikiforov–Uvarov method J. Korean Phys. Soc. 68 (2016)505.
- [23] Choi JR, S. Menouar, S.Medjber and H. Bekkar, Quantum features of molecular interactions associated with time dependent non-central potentials, J. Phys. Commun. 1 (2017) 052001.
- [24] H. Sobhani and H. Hassanabadi, Behavior differences of time dependent harmonic oscillator in commutative space and non commutative space, physics of particle and nuclei letters 15 (2018) 469.

الملخص:

في هذا العمل ، قمنا بحل معادلة شرودنجر أحادية البعد لكمون مورس غير مستقر. استعملنا طريقة فصل المتغيرات و طريقة نيكيفوروف ايفاروف لتحويل معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية إلى معادلة تفاضلية من النوع فوق الهندسي. تحصلنا على طيف الطاقة و الشكل النهائي لدوال الموجة ككثيرات حدود لقرار.

كلمات مفتاحية: معادلة شرودنجر, طريقة نيكيفوروف ايفاروف, كمون مورس.

Résumé :

Dans ce travail, nous avons résolu l'équation de Schrödinger unidimensionnelle pour le potentiel de Morse non stationnaire. Nous avons appliqué la méthode de séparation de variable et la méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U) pour réduire l'équation différentielle du deuxième degré à une équation différentielle de type hypergéométrique. Nous avons obtenu le spectre d'énergie et la forme finale des fonctions d'onde en termes du polynôme de Laguerre.

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

Abstract:

In this work, we have solved the one-dimensional Schrödinger equation for non-stationary Morse potential. We have used the method of separation of variables and the (N-U) method to reduce the second order differential equation to a hypergeometric differential equation. We have obtained the spectrum energy and the corresponding wave functions in terms of the Laguerre polynomials.

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