



N° d'ordre :/2016

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

Université Mohamed Boudiaf - M'sila

Faculté des Sciences

Département de Physique

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

MASTER

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

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

Par

ABDELHAFID Farida

THEME

Traitement d'un potentiel non central par la méthode de
Nikiforov -Uvarov

Soutenu le : 05/06/2016

Devant le jury composé de :

K. BOUFERRACH	MAB	Univ. de M'sila	Président
A. GHOUMAIID	MAA	Univ. de M'sila	Rapporteur
M. BOUSSAHEL	MCA	Univ. de M'sila	Examineur

Promotion Juin 2016

Remerciements

Je remercie d'abord et avant tout, Dieu le tout puissant pour m'avoir donné toute cette force et ce courage pour faire aboutir ce travail et grand merci à mon mère et mon père ceux qui se tenait à côté de moi tout au long de mes études.

*Je remercie particulièrement à mon encadreur **Mr: A. Ghoumaïd** pour ses conseils et ses orientations, son encouragement qui m'ont aidé à réaliser ce travail et j'avais l'honneur de travailler sous son assistance et je lui suis également reconnaissant pour la confiance qu'il m'a accordée.*

Je remercie aussi les membres de jury d'avoir accepté de juger ce modeste travail.

Mes remerciements vont aussi à tous les enseignant de département de physique de l'université de M'sila et tous ceux qui ont contribué de près ou de loin, à notre formation scientifique.

En fin je remercie tous ceux qui ont contribué de près ou de loin au bon déroulement de ce travail.

Dédicace

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

Je dédie ce travail à ma chère maman et mon cher papa qui ont vraiment souffert pour moi. Pour tous mes frères et mes sœurs. Pour toute ma famille et tous mes enseignants et mes amis sans citer les nomes.

Je dédie ce travail à tous ceux savent moi et m'a souhaité toujours le bon travail.

A. Farida

Table des matières

-Introduction générale..... 03

Chapitre I :

Généralités sur la mécanique classique et l'équation de Schrödinger

1. Rappels de mécanique classique.

1-1-Introduction 05

1-2-L'équation d'Euler Lagrange06

1-3- l'équation de Hamilton08

1-4- les croches de poisson10

 1-4-1- définition10

 1-4-2- Formule des crochets de poisson10

2. l'équation de Schrödinger en mécanique quantique.

2-1-Introduction 12

2-2-définition.....12

2-3-l'équation de Schrödinger en coordonnées cartésiennes12

2-4- l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques.....13

2- 5- solution de l'équation de Schrödinger15

Chapitre II :

La méthode de Nikiforov-Uvarov

1-introduction17

2- définition17

3- Équation différentielle de Nikiforov-Uvarov... 18

4-Solutions de l'équation différentielle de NU	18
4.1. Changement de fonction	18
4.2. Valeurs propres	21
4.3. Fonctions propres	22

Chapitre III

Résolution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel non central par

La méthode de Nikiforov-Uvarov

1-introduction	24
2- le potentiel non central	25
3-l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques pour un potentiel non central.....	25
4-Séparation des variables	26
5- Solutions de l'équation radiale et angulaire par la méthode du NU	28
5-1- La partie radiale	28
5-1-1- spectre d'énergie	29
5-1-2-fonction d'onde	30
5-2- La partie angulaire	32
5-2-1- spectre d'énergie.....	32
5-2-2- fonction d'onde	34
6-Cas particulier : potentiel de Hartmann en forme d'anneau.....	36
7-conclusion	38
-conclusion générale.....	39
-Bibliographique	40

Introduction générale

La structure atomique interne de la matière était restée un grand mystère dans le cadre de la mécanique classique quels sont limitées à l'étude des systèmes macroscopique ; dans ce mécanique l'état d'un système physique est bien défini par la connaissance des variables dynamiques, qui sont des quantités continues d'où la continuité des grandeurs qui déterminent l'état du système et l'énergie. Jusqu'à XX siècle ; entre (1922 - 1927) les physiciens: Niels Bohr, Dirac, Louis de Broglie, Werner Heisenberg, Jordan, Max Pauli et Erwin Schrödinger et quelques autres ; ont proposée une nouvelle mécanique; appelé la mécanique quantique et la théorie mathématique et physique décrivant la structure et l'évolution dans le temps et l'espace des phénomènes physiques à l'échelle de l'atome et en dessous. Elle a été découverte lorsque les physiciens ont voulu décrire le comportement des atomes et les échanges d'énergie entre la lumière et la matière à cette échelle.

Dans la mécanique quantique, l'étude d'un système microscopique est basée sur la résolution d'une équation différentielle non relativiste proposée par Schrödinger, cette équation c'est celle qu'on appelle aujourd'hui l'équation de Schrödinger.

L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la mécanique quantique non relativiste. Elle joue en mécanique quantique le même rôle que l'équation de Newton, de Lagrange ou de Hamilton en mécanique classique ou les équations de Maxwell en électromagnétisme. Elle décrit l'évolution temporelle de l'état d'un objet quantique en cherchant se qu'on appel la fonction d'onde ainsi le spectre d'énergie des différents états possibles. On distingue deux cas à étudié : le premier dépendant du temps et l'autre stationnaire.

L'équation de Schrödinger stationnaire est une équation différentielle de second degré par rapport aux variables spatiaux, elle est aussi à coefficient variable grâce au terme énergie potentielle. La solution de cette équations n'est donc pas toujours facile, les physiciens ont tenté de trouver des méthodes analytiques pour la résoudre, ils ont réussi à trouver les fonctions d'ondes et le spectre d'énergie pour plusieurs types de potentiels ; (potentiel de

Colomb, Wood saxon, de Morse, Hulthen [14] ...) et par différentes méthodes mathématique qui se divisent en deux catégories : approximatives par exemple (la théorie des perturbations [9], la méthode variationnelle de Ritz [11], la phase de Berry...) et autres méthodes exactes comme (changement de représentation, la théorie des invariants, les transformations unitaires...), nous allons étudier cette équation dans ce travail par une méthode mathématique traditionnelle et simple c'est la méthode de Nikiforov-Uvarov [2-12].

Ce travail est organisé en trois chapitres, structuré comme suit :

Dans le premier chapitre ; nous allons rappeler quelques concepts essentiels de la mécanique de Lagrange et de Hamilton et les différences entre les deux formalismes ; qui sont deux formalismes analytiques plus simple que le formalisme de la mécanique de Newton; par la suite, nous écrivons les expressions mathématiques fréquemment utilisées dans les différentes branches de la physique (la théorie des groupes, géométrie différentielle...); crochets de Poisson (1781 - 1840).

Dans une deuxième partie, nous exposerons une description détaillée sur l'équation de Schrödinger en coordonnées cartésiennes et en coordonnées sphériques respectivement en citant à la fin quelques méthodes analytiques utilisées pour la résolution de cette équation.

Dans le deuxième chapitre nous expliquerons en détails les différentes étapes de la méthode de Nikiforov-Uvarov (Nikiforov & Uvarov, 1988); qui est une méthode mathématique utilisée pour résoudre les équations différentielles de second ordre (de type hypergéométrique) est qui montre dernièrement un grand succès dans le traitement analytique d'un grand nombre des problèmes quantiques relativistes ou non relativistes.

Le troisième chapitre représente l'essentiel de notre travail concernant le traitement d'un potentiel non central par la méthode de Nikiforov-Uvarov. On va donner la solution exacte de l'équation de Schrödinger à la présence de ce type de potentiel, on tire les fonctions d'ondes proprement orthonormalisées ainsi que le spectre d'énergie du système en considération. Le potentiel en forme d'anneau de Hartmann représente un cas particulier de notre potentiel et donc représente une vérification directe de nos résultats qui s'avèrent en excellent accord.

Avec une conclusion générale se termine ce travail.

Chapitre 01

*Généralités sur
La Mécanique Classique
Et
L'équation de Schrödinger*

Chapitre I: Généralités sur la mécanique classique Et L'équation de Schrödinger

1. Rappels de mécanique classique

1.1. Introduction :

Dans la première partie de ce chapitre nous allons rappeler brièvement quelques concepts essentiels de la mécanique analytique (Lagrange et Hamilton) et dans une seconde partie nous rappelons les principes de la mécanique quantique représentés par l'équation de Schrödinger.

Au début du XVIIe siècle, Isaac Newton a complété la formulation macroscopique de la mécanique classique appelée (mécanique newtonienne) qui s'intéresse principalement à l'interprétation du mouvement des planètes et des objets sur la terre, par des méthodes d'analyse mathématiques. Par la suite Lagrange et Hamilton ont proposé deux formalismes différents pour traiter les phénomènes physiques à l'état macroscopique et qui s'avèrent plus simple que le formalisme de Newton; reposant sur le fait que le mouvement du corps se fait en gardant toujours un minimum de l'énergie potentielle. Ces deux formalismes sont en accord avec les résultats obtenus par Newton.

Nous pouvons dire que la mécanique classique principalement appuyés sur les équations de Joseph-louis Lagrange (1736-1813) et William Rowan Hamilton (1805-1865) [3]; qui représentent deux nouvelles formulations mathématique des lois de la mécanique; n'utilise pas l'algèbre linéaire traditionnelle.

Dans le suivant paragraphe nous donnerons un aperçu général sur les équations d'Euler Lagrange. Dans le troisième paragraphe, nous expliquerons brièvement le formalisme de Hamilton ainsi que les propriétés mathématiques des crochets de Poisson et nous terminerons par un quatrième paragraphe qui sera consacré à l'exposition du passage vers la mécanique quantique traduite par l'équation de Schrödinger.

1. 2. L'équation d'Euler Lagrange :

La configuration d'un système physique à un moment donné est en principe spécifiée par n paramètres réels dépendant de temps qu'on peut noter $q_i (i = 1, 2, \dots, n)$ et qu'on appelle coordonnées généralisées.

Pour un système physique décrit par les équations de Lagrange on a en fait $3N$ coordonnée de position $q_i(t)$ et $3N$ coordonnée de vitesse $\dot{q}_i(t)$.

$$\text{Où : } \dot{q}_i(t) = \frac{dq_i}{dt} \quad (i = 1, 2, 3, \dots \dots \dots)$$

Dites vitesses généralisées.

La fonction de Lagrange, ou lagrangien du système $L(q_i, \dot{q}_i)$ est la fonction des $6N$ variables, à partir de $q_i(t)$ et $\dot{q}_i(t)$ le lagrangien dépend aussi implicitement du temps ; donné par la différence entre l'énergie cinétique totale T et l'énergie potentiel V comme :

$$L(q_i, \dot{q}_i, t) = T - V \tag{1.1}$$

$$\text{Où } T = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 \quad \text{et} \quad V = V(q)$$

$$\text{Donc : } L(q_i, \dot{q}_i, t) = \frac{1}{2} m \dot{q}_i^2 - V(q_i) \tag{1.2}$$

On détermine l'équation d'Euler Lagrange comme conséquence du principe de moindre action, avec l'action classique du système entre deux point q_1 et q_2 respectivement est donnée par:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i(t), \dot{q}_i(t), t) dt \tag{1.3}$$

Où : t_1 et t_2 désignent respectivement l'instant initial en q_1 et l'instant final en q_2 .

On remplace l'expression de lagrangien (1.2) dans (1.3) on obtient:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q) \right) dt \tag{1.4}$$

Considérons une trajectoire $q_i(t)$ et une trajectoire proche $q_i(t) + \delta q_i(t)$ de mêmes extrémités ; où $\delta q_i(t)$ sont infiniment petits ; pour q_1 et q_2 c'est-à-dire :

$$\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0 \quad (1.5)$$

Alors la variation de l'action est donnée par :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \delta L(q_i, \dot{q}_i, t) dt \quad (1.6)$$

Donc :

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} L(q_i + \delta q_i, \dot{q}_i + \delta \dot{q}_i, t) dt - \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) dt \end{aligned} \quad (1.7)$$

En utilisant le fait que $\delta \dot{q}_i = \frac{d}{dt} \delta q_i$ et en intégrant par partie, (1.7) devient :

$$\delta S = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i dt \quad (1.8)$$

Donc :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i dt$$

Car le premier terme dans (1.8) est nul à cause des conditions (1.5).

Le principe de moindre action qui stipule que ($\delta S = 0$), nous fournis les équations du mouvement dites équation d'Euler-Lagrange [4].

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{dL}{d\dot{q}_i} \right) - \frac{dL}{dq_i} = 0 \quad (1.9)$$

Les équations de Lagrange sont importantes à plus d'un titre en mécanique classique.

Les équations de mouvement à partir des équations d'Euler Lagrange s'écrivent toujours, quelles que soient les coordonnées $q_i(t)$ choisies.

1.3. L'équation de Hamilton :

Dans la formulation de Hamilton, les équations de mouvement des systèmes physiques, par contre à Lagrange, sont des équations différentielles du premier ordre. Dans cette formulation, le système physique s'explique par les $3N$ coordonnées généralisées q_i et les $3N$ moments conjugués p_i et du temps t . par définition le moment conjugué est:

$$p_i = \frac{dL}{dq_i} \quad (i = 1, 2, \dots, f) \quad (1.10)$$

p_i Appelé aussi impulsion généralisée et f degré de liberté dans les équations de Lagrange et égale à $2f$ dans les équations de Hamilton. Construire l'équation de Hamilton ou hamiltonien est défini par la somme de l'énergie cinétique et l'énergie potentielle comme suit :

$$H = T + V \quad (1.11)$$

Et l'expression de H en fonction de L devient :

$$H(p_i, q_i, t) = \sum_1^f p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t) \quad (1.12)$$

En différentiant (1.12), il vient :

$$dH = \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt = \dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (1.13)$$

En utilisant l'équation (1.14) dans l'équation d'Euler – Lagrange (1.9) on trouve :

$$\frac{dL}{dq_i} = \frac{d}{dt} p_i = \dot{p}_i \quad (1.14)$$

On remplace les expressions de $\frac{dL}{dq_i}$ et $\frac{dL}{d\dot{q}_i}$ figurant dans les deux équations (1.10) et (1.14) dans l'équation (1.13), on voit que l'expression de dH devient :

$$dH = \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt = \dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (1.15)$$

Par comparaisons des coefficients de dq_i et dp_i dans (1.15) on obtient les équations de mouvement ou les équations de Hamilton:

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases} \quad (1.16)$$

Les équations de Hamilton sont du premier ordre, elles nous permettent de prédire l'évolution future du système qui sera complètement spécifiée en connaissant l'état du système à un moment donné.

Le tableau suivant donne une comparaison des deux formalismes [13]:

formalisme lagrangien	formalisme hamiltonien
<p>1- L'état d'un système avec n degrés de liberté est décrit par n coordonnées (q_1, \dots, q_n) et n vitesses $(\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n)$, ou dans une notation plus compacte par (q, \dot{q}).</p> <p>2- L'état du système peut être représenté par un point se déplaçant à une vitesse définie dans un espace de configuration à N dimensions.</p> <p>3- Les coordonnées de n évoluent en fonction de n deuxième ordre équations.</p> <p>4- pour un L donné, plusieurs trajectoires peuvent passer par un point donné dans l'espace de configuration en fonction de \dot{q}.</p>	<p>1- L'état d'un système avec n degrés de liberté est décrit par n coordonnées et n Moment $(q_1, \dots, q_n; p_1, \dots, p_n)$, ou plus succinctement, par (q, p).</p> <p>2- L'état du système peut être représenté par un point dans un espace de phase $2N$ dimensions de coordonnées $(q_1, \dots, q_n; p_1, \dots, p_n)$.</p> <p>3- Les $2n$ coordonnées et les $2n$ impulsions obéissent aux équations de premier ordre.</p> <p>4- pour un H donné qu'une seule trajectoire passe par un point donné dans l'espace de phase.</p>

1.4. Les crochets de Poisson:

1.4.1. Définition :

Les crochets de Poisson sont des expressions mathématiques, introduites initialement dans le cadre de la mécanique Analytique. Ils permettent de donner une formulation des équations de mouvement d'un système mécanique particulièrement apte à trouver des lois de conservations et surtout, on les retrouve de façon centrale en mécanique quantique avec les conditions de quantification canonique, Les crochets de Poisson aussi sont étroitement liés à la théorie des groupes et des algèbres de Lie et se retrouvent donc partout en physique théorique et en géométrie différentielle.

1.4.2. Formule des crochets de poisson :

Le crochet de Poisson de deux fonctions F et G ; $[F, G]$ par rapport aux variables canoniques (q_i, p_i) est défini comme suit :

$$[F, G] = \sum_i \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial G}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \quad (1.17)$$

Supposons, à présent, que nous choisissons les fonctions F et G parmi les variables canoniques (q_i, p_i) elle-même. Alors à partir de la définition (1.17) les valeurs des divers crochets de Poisson correspondants :

$$[p_i, p_j] = [q_i, q_j] = 0 \quad (1.18)$$

$$[q_i, p_j] = -[p_i, q_j] = \delta_{ij} \quad \text{Où :} \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1. \text{ si } (i = j) \\ 0. \text{ si } (i \neq j) \end{cases} \quad (1.19)$$

On vérifie que :

- $[F, G] = -[G, F]$ (Antisymétrie).
- $[F, aG + bH] = a[F, G] + b[F, H]$ (Linéarité).
- $[FG, H] = [F, H]G + F[G, H]$ (Différentiation d'un produit).
- $[F, [G, H]] + [G, [H, F]] + [H, [F, G]] = 0$ (Identité de Jacobi).

On peut écrire les équations de Hamilton dans le langage des crochets de Poisson est :

$$\begin{cases} \dot{p}_i = [p_i, H] \\ \dot{q}_i = [q_i, H] \end{cases} \quad (1.20)$$

À l'aide des équations de Hamilton, On peut écrire des équations différentielles sous la forme:

$$\dot{F} = [F, H] + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (1.21)$$

Où $H(q_i, p_i)$ est l'énergie totale d'un système mécanique dite Hamiltonien.

En supposant que la fonction F ne dépende pas explicitement du temps si son crochet de Poisson avec H s'annule c'est -à -dire:

$$[F, H] = 0$$

2. L'équation de Schrödinger dans la mécanique quantique.

2.1. Introduction :

A l'état macroscopique, la mécanique classique présente un grand succès et nous permet de prédire avec certitude le mouvement future des systèmes physiques, mais à l'échelle de l'atome et ci-dessous sa restait insatisfaisant, en effet la mécanique classique n'a pas pu expliquer le mouvement de l'électron dans l'atome d'Hydrogène comme il n'a pas pu donner des explications concernant la dualité onde-corpuscule et plusieurs autres phénomènes microscopiques. Jusqu'au début du XX^{ème} siècle, les physiciens W.Heisenberg et E. Schrödinger, de 1925 à 1926, ont formulé deux théories quantiques plus systématiques, en apparence différentes mais qui se sont révélées équivalentes. Sur cette base, grâce aux efforts de ces deux savants, de P. Dirac, J. Von Neumann, N. Bohr, M. Born et d'autres, une nouvelle Mécanique a été créée: la Mécanique quantique ; en mécanique quantique les phénomènes sont décrits par la fonction d'onde Ψ , qui contient toutes les informations sur les particules d'un système et son comportement suit l'équation de Schrödinger [1].

2.2. Définition :

L'équation de Schrödinger, conçue par le physicien autrichien Erwin Schrödinger en 1926, Cette équation décrit l'évolution de l'onde de probabilité d'un électron (ou de sa fonction d'onde). Elle constitue l'un des fondements de la théorie quantique.

La mécanique quantique est basée sur la résolution de l'équation de Schrödinger, qui est une équation différentielle de second degré par rapport à la position et premier degré par rapport au temps, on s'intéresse ici par le cas stationnaire (indépendant de temps).

2.3. L'équation de Schrödinger en coordonnées cartésiennes :

Nous nous limitons ici à l'étude des solutions stationnaires, fournies par l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$H\Psi = E\Psi \tag{1.22}$$

Où E et Ψ sont respectivement l'énergie et la fonction d'onde de la particule et H représente l'opérateur hamiltonien ; qui est définie classiquement par la relation (1.11).

L'opérateur énergie cinétique T s'écrit aussi comme en mécanique classique sous la forme :

$$T = \frac{p^2}{2m} \quad (1.23)$$

Où : \mathbf{p} est l'impulsion de la particule. Cependant, en mécanique quantique l'impulsion est un opérateur différentiel :

$$\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \quad (1.24)$$

Où : \hbar est la constante de Planck réduite ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$).

Et nabla ($\vec{\nabla}$) est le vecteur gradient dont les trois composantes cartésiennes sont $(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$.

Les équations (1.22) à (1.24) permettent de réécrire l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (1.25)$$

C'est l'équation de Schrödinger indépendante du temps (le cas stationnaire).

Afin de simplifier les formules dans l'étude de quelques problèmes de la physique théorique, nous choisissons le système d'unités qui vérifie :

$$\hbar = 2m = e = c = 1 \quad (1.26)$$

Sont respectivement : la constante de Planck réduite, la masse, la charge de l'électron et la vitesse de la lumière.

2.4. L'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques :

Le passage d'équation de Schrödinger en coordonnées cartésiennes, vers les coordonnées sphériques ; $\Psi(\mathbf{r})$ devient :

$$\Psi(\mathbf{r}) \rightarrow \Psi(r, \theta, \varphi)$$

Et en écrivant aussi le Laplacien (Δ) en coordonnées sphériques.

Nous représentons traditionnellement un système en coordonnées sphériques de la façon suivante:

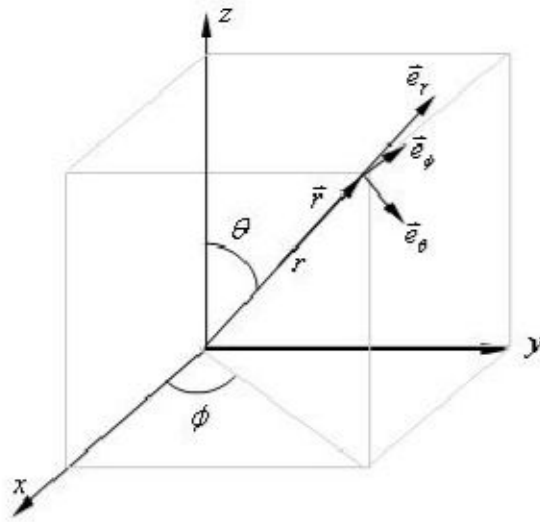


Figure (1): Représentation du système des coordonnées sphériques.

Rappelons que la relation entre les coordonnées cartésiennes et sphériques sont données par les relations :

$$\left\{ \begin{array}{l} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}; 0 \leq r < \infty \\ \varphi = \tan^{-1}(y/x); 0 \leq \varphi \leq 2\pi \\ \theta = \cos^{-1}\left(\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right) = \cos^{-1}(z/r); 0 \leq \theta \leq \pi \end{array} \right. \quad (1.27)$$

Nous avons inversement:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad y = r \sin \theta \sin \varphi \quad z = r \cos \theta.$$

Pour trouver l'expression du Laplacien en coordonnées sphériques, nous allons utiliser l'intuition du physicien et les notions de similitude entre les coordonnées.

Où (Δ) est définie comme le carré d'opérateur nabla, donc l'opérateur Laplacien en coordonnées cartésiennes est donné par :

$$\Delta = \vec{\nabla}^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (1.28)$$

Et l'opérateur nabla dans les trois composantes sphériques est :

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

À partir de la définition de (Δ) et la dernière expression, nous obtenons l'expression finale de l'opérateur Laplacien en coordonnées sphériques, appelé aussi laplacien sphérique, est défini en termes de distance r de l'origine du système de coordonnées et en termes de deux angles ; la latitude (θ) et l'angle azimutal (φ) comme suit :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (1.29)$$

Maintenant; en gardant à l'esprit l'équation de Schrödinger donné dans l'équation (1.25), nous allons utiliser la relation de (Δ) en coordonnées sphériques donnée par (1.29), et nous développons l'équation de Schrödinger dans les systèmes de coordonnées sphériques nous aboutissons à :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \Psi(r, \theta, \varphi) + V(\mathbf{r}) \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (1.30)$$

C'est l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques dans le cas stationnaire.

2.5. Solution de l'équation de Schrödinger:

Les solutions analytiques exactes de l'équation de Schrödinger pour des potentiels physiques sont très essentielles puisque la connaissance des fonctions d'ondes et de l'énergie contient toute l'information importante possible des propriétés physiques du système quantique. Ils existent plusieurs méthodes pour résoudre l'équation de Schrödinger, le choix d'une méthode particulière repose généralement sur la forme du potentiel et sur celle de la fonction d'onde recherchée.

Rappelons quelques méthodes fréquemment utilisées:

- la théorie des perturbations [9]
- la méthode variationnelle de Ritz [11]
- QMC (quantum Monte Carlo) [6]
- méthode de Hartree-Fock [5]
- DVR (discret variable representation) [7]
- La méthode de Nikiforov-Uvarov [2-12]...etc.

Dans ce qui suit, nous choisissons de traiter un problème stationnaire de la physique quantique par la méthode de NU, ce problème qui sera étudié dans le troisième chapitre consiste à résoudre l'équation de Schrödinger à la présence d'un potentiel non central.

Chapitre 02

LA Méthode

DE

Nikiforov-Uvarov

Chapitre II :

La méthode de Nikiforov-Uvarov

1. Introduction :

Parmi les nombreuses équations de la physique qui sont traitées de différentes manières, on trouve l'équation de Klein-Gordon, Dirac, Schrödinger, cette dernière ; qui est une équation différentielle de deuxième ordre par rapport la position du système et du premier par rapport au temps ; est d'intérêt spécial en physique quantique non relativiste, en effet la résolution de cette équation nous fournis toutes les informations sur le système étudié. Le terme potentiel d'interaction rendre cette équation sous une forme pas vraiment facile à intégrer. L'équation de Schrödinger peut être citée (à l'aide de quelques astuces mathématique) parmi une famille d'équations différentielles acceptant des solutions analytiques, cette famille d'équations différentielle a été complètement traitée par les deux savons Nikiforov et Uvarov dans leurs livre [2-12]

Dans ce chapitre nous présentons en détailles les différentes étapes de cette méthodes (Nikiforov-Uvarov).

2. Définition :

La méthode de Nikiforov-Uvarov [2-12], représente un très fort outil mathématique pour la résolution d'équations différentielles du second ordre à coefficients variables sous forme de polynômes, elle a été employée avec succès dans le traitement analytique d'un grand nombre de problèmes de la physique théorique dans le cas stationnaire et relativiste. En effet cette méthode nous permet de donner les fonctions d'ondes et le spectre d'énergie de l'équation de Schrödinger, de Klein-Gordon, de Dirac et de Duffin-Kemmer-Petiau en présence de quelques potentiels centraux et non centraux bien connus.

Dans ce qui suit nous expliquerons en détail le formalisme mathématique de cette méthode et la manière d'utilisation de cette dernière pour traiter des problèmes de la physique.

3.Équation différentielle de Nikiforov-Uvarov :

Le but de la méthode NU est de résoudre toute équation différentielle de la forme :

$$\Psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \Psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} \Psi(s) = 0 \quad (2.1)$$

Dite de type hypergéométrique.

Ici, $\sigma(s)$ et $\tilde{\sigma}(s)$ sont deux polynôme au plus de seconde degré :

$$\begin{cases} \sigma(s) = a_1 s^2 + a_2 s + a_3 \\ \tilde{\sigma}(s) = b_1 s^2 + b_2 s + b_3 \end{cases}$$

Alors que $\tilde{\tau}(s)$ est un polynôme au plus de degré 1 :

$$\tilde{\tau}(s) = c_1 s + c_2$$

Avec : $a_1, a_2, a_3, b_1, b_2, b_3, c_1$ et c_2 sont des constants.

4. Solutions de l'équation différentielle de (N-U):

4.1. Changement de fonction :

La première étape dans cette méthode est le changement de fonction suivant :

$$\Psi(s) = \phi(s)Y(s) \quad (2.2)$$

Partant de l'équation (2.2) on a

$$\Psi'(s) = \phi'(s)Y(s) + \phi(s)Y'(s) \quad (2.3)$$

$$\Psi''(s) = \phi''(s)Y(s) + \phi'(s)Y'(s) + \phi'(s)Y'(s) + \phi(s)Y''(s) \quad (2.4)$$

En insérant les équations (2.3) et (2.4) dans l'équation (2.1) on obtient :

$$Y''(s) + \left(2 \frac{\phi'(s)}{\phi(s)} + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\right) Y'(s) + \left(\frac{\phi''(s)}{\phi(s)} + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \frac{\phi'(s)}{\phi(s)} + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\right) Y(s) = 0 \quad (2.5)$$

Nous choisissons la fonction $\phi(s)$ qui nous permet d'écrire le coefficient de $Y'(s)$ sous la forme $\frac{\tau(s)}{\sigma(s)}$; où $\tau(s)$ est un polynôme au plus de degré 1. Cela nous donne :

$$2 \frac{\phi'(s)}{\phi(s)} + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} = \frac{\tau(s)}{\sigma(s)} \quad (2.6)$$

Et $\phi(s)$ est un dérivé logarithmique dont la solution a obtenu à partir de la condition :

$$\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \quad (2.7)$$

Après avoir comparé les équations (2.6) et (2.7), nous constatons que :

$$\pi(s) = \frac{1}{2} [\tau(s) - \tilde{\tau}(s)] \quad (2.8)$$

Donc, nous savons à partir de (2.8), le nouveau paramètre $\pi(s)$ est un polynôme de degré tout au plus 1, de la dernière équation nous écrivons :

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) \quad (2.9)$$

- $\tau(s)$ doit vérifier la condition ($\tau'(s) < 0$). Qui nous donne les solutions physiquement acceptables.

Afin de simplifié l'équation (2.5) et le coefficient de $Y(s)$ dans (2.7), calculons tout d'abord $\left(\frac{\phi'(s)}{\phi(s)}\right)'$:

$$\left(\frac{\phi'(s)}{\phi(s)}\right)' = \frac{\phi''(s)}{\phi(s)} - \left(\frac{\phi'(s)}{\phi(s)}\right)^2 \quad (2.10)$$

À partir de (2.7) et (2.10) nous écrivons :

$$\frac{\phi''(s)}{\phi(s)} = \left(\frac{\pi(s)}{\sigma(s)}\right)' + \left(\frac{\pi(s)}{\sigma(s)}\right)^2 \quad (2.11)$$

Dans ce cas-ci, le coefficient de $Y(s)$ transformé en forme plus appropriée en prenant l'égalité donné dans (2.7)

$$\frac{\phi''(s)}{\phi(s)} + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \frac{\phi'(s)}{\phi(s)} + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} = \frac{\bar{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} \quad (2.12)$$

Où:

$$\bar{\sigma}(s) = \tilde{\sigma}(s) + \pi^2(s) + \pi(s)[\tilde{\tau}(s) - \sigma'(s)] + \pi'(s)\sigma(s) \quad (2.13)$$

On obtient $\bar{\sigma}(s)$ en fonction de $\tilde{\sigma}(s)$, $\pi^2(s)$ et $\sigma(s)$ c-à-dire $\bar{\sigma}(s)$ est un polynôme au plus de degré 2.

Donc (2.5) est écrit de la même forme de (2.1)

$$Y''(s) + \frac{\tau(s)}{\sigma(s)} Y'(s) + \frac{\bar{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} Y(s) = 0 \quad (2.14)$$

Par suite des transformations algébriques mentionnées ci-dessus, la forme fonctionnelle d'équation (2.1) est protégée d'une manière systématique. Le polynôme $\bar{\sigma}(s)$ dans l'équation (2.13) est divisible par $\sigma(s)$ on écrit :

$$\bar{\sigma}(s) = \lambda\sigma(s) \quad (2.15)$$

Où λ une constante.

Donc l'équation (2.14) est réduite à une équation de type hypergéométrique :

$$\sigma(s)Y''(s) + \tau(s)Y'(s) + \lambda Y(s) = 0 \quad (2.16)$$

Afin de trouver la forme du polynôme $\pi(s)$ qui est un polynôme du premier degré, nous utilisons les deux équations (2.13) et (2.15)

$$\pi^2(s) + \pi(s)[\tilde{\tau}(s) - \sigma'(s)] + \pi'(s)\sigma(s) + \tilde{\sigma}(s) = \lambda\sigma(s) \quad (2.17)$$

Si on pose: $k = \lambda - \pi'(s)$ (2.18)

Une constante.

L'équation (2.17) devient :

$$\pi^2(s) + \pi(s)[\tilde{\tau}(s) - \sigma'(s)] + \tilde{\sigma}(s) - k\sigma(s) = 0 \quad (2.19)$$

L'équation (2.19) est une équation du second ordre par rapport à $\pi(s)$, essayant maintenant de résoudre cette équation, on a :

$$\Delta = [\tilde{\tau}(s) - \sigma'(s)]^2 - 4(\tilde{\sigma}(s) - k\sigma(s))$$

Donc :

$$\pi(s) = \frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(s) + k\sigma(s)} \quad (2.20)$$

Comme a été signalé précédemment, le polynôme $\pi(s)$ est un polynôme au plus de degré 1, ceci est vrai si et seulement si l'expression sous la racine carrée de l'équation (2.19) doit être carré d'un polynôme au plus de degré 1 aussi, et pour cela il faut que discriminant de l'expression quadratique sous la racine est nulle. Cette condition ($\Delta = 0$) nous donne la valeur de la constant k .

Après la détermination de k , le polynôme (2.19), et puis $\tau(s)$ et λ ont également obtenus en employant les équations (2.9) et (2.18), respectivement.

4.2. Valeurs propres :

Dans l'équation (2.16) en cherchant des solutions sous la forme:

$$Y_n = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n s^n$$

Donc:

$$Y'_n = \sum_{n=1}^{+\infty} n a_n s^{n-1}$$

ET aussi:

$$Y''_n = \sum_{n=2}^{+\infty} n(n-1) a_n s^{n-2}$$

Donc (2.16) devient :

$$\sigma(s) \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)a_n s^{n-2} + \tau(s) \sum_{n=1}^{\infty} n a_n s^{n-1} + \lambda \sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n = 0 \quad (2.21)$$

En remplace les expressions de $\sigma(s)$ et $\tau(s)$ on obtient :

$$a_1 n(n-1)s^n + c_1 n s^n = -\lambda_n s^n$$

Avec : $(\sigma''(s) = 2a_1)$ et $(\tau'(s) = c_1)$.

La méthode de Frobenius nous donne la relation :

$$\lambda = \lambda_n = -n \left(\tau'(s) + \frac{(n-1)}{2} \sigma''(s) \right) \quad (2.22)$$

Où λ_n représentent se qu'on les valeurs propres de l'équation différentiel (2.16).

La nouvelle valeur propre de l'énergie est obtenue en utilisant l'équation (2.18) et (2.22).

4.3. Fonctions propres:

Pour générer les fonctions propres correspondantes, avec la condition $\tau'(s) < 0$ qu'est Obligatoire. La solution de la deuxième partie de la fonction d'onde, $Y_n(s)$ est donnée par la formule de Rodrigues [8] :

$$Y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s) \rho(s)] \quad (2.23)$$

Où B_n est une constante de normalisation et $\rho(s)$ représente la fonction résolvante (fonction poids), qui a été trouvé à partir de l'équation suivante:

$$\sigma(s)Y''(s) + \tau(s)Y'(s) = -\lambda Y(s) = \frac{1}{\rho(s)} [\rho(s)\sigma(s)Y'(s)]' \quad (2.24)$$

Et $\rho(s)$ est un dérivé logarithmique dont la solution a obtenu à partir de l'expression :

$$\frac{\rho'(s)}{\rho(s)} = \frac{\tau(s) - \sigma'(s)}{\sigma(s)} \quad (2.25)$$

En supposant que $\rho(s)$ est une fonction analytique sur et à l'intérieur d'un contour fermé C entourant le point ($s = z$) et faisant usage de théorème intégral de Cauchy [10].

Nous pouvons écrire :

$$Y_n(s) = \frac{C_n}{\rho(s)} \int_C \frac{\sigma^n(z)\rho(z)}{(z-s)^{n+1}} dz \quad (2.26)$$

Où C_n est une constante de normalisation et $\rho(s)$ satisfait (2.25) ceci suggère de chercher une solution particulière de (2.16).

L'équation du type hypergéométrique a la solution particulière de la forme (2.26) si :

- 1- les dérivés des fonctions $Y_n(s)$ peuvent être calculés par la différenciation sous le signe intégral
- 2- la condition suivante est satisfaite aux points finaux de la découpe C , à $z = z_1$ et $z = z_2$:

$$\sigma(z)\rho(z)z^k \Big|_{z_1}^{z_2} = 0 \quad (k = 0, 1, \dots) \quad (2.27)$$

Où : z_1 et z_2 sont les points final de C .

La fonction d'onde du système est donc obtenue à partir de l'équation (2.7), (2.23) et (2.25).

Chapitre 03

*Résolution de l'équation de
Schrödinger pour un potentiel
Non central par la méthode de
Nikiforov-Uvarov*

Chapitre III :

Résolution de l'équation de Schrödinger pour un Potentiel non central par la méthode De Nikiforov-Uvarov

1. introduction :

Un des problèmes intéressants de la mécanique quantique non relativiste est de trouver les solutions exactes de l'équation de Schrödinger pour certains potentiels d'intérêt physique. Ces dernières années, des efforts considérables ont été faits pour obtenir les solutions analytiques des problèmes non centraux. La solution de l'équation de Schrödinger pour des potentiels non centraux a fait l'objet de travail de nombreuses chercheuses en utilisant différentes méthodes ; par la méthode supersymétrique dans [15,16], par l'intégrale de chemin [17] et Bessel [18,19].

Le but de ce chapitre est de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger à la présence d'un potentiel généralisé à symétrie axial (potentiel non central). La méthode utilisée pour traiter ce problème est celle de NIKIFOROV-UVAROV qui s'avère plus simple à utiliser que plusieurs autres méthodes. Dans le suivant paragraphe nous donnerons la forme du potentiel traité. Par la suite et dans le quatrième paragraphe en utilisant la méthode de séparation des variables on arrive à écrire deux équations différentielles l'une radiale et l'autre angulaire, la partie angulaire est séparée en deux autres équations différentielles une dépendante de φ qui s'intègre facilement et l'autre de θ . Dans le cinquième paragraphe nous allons résoudre l'équation différentielle radiale et angulaire par la méthode de NU. Ce traitement nous fournit le spectre d'énergies et les fonctions d'ondes proprement orthonormalisées, le potentiel de Hartmann en forme d'anneau (proposé par Hartmann en 1972) [24] représente un cas particulier du problème considéré. En fin nous terminerons par une conclusion générale.

2. Le potentiel non central :

Le potentiel Coulombien en forme d'anneau, Hartmann, ou généralement chaque potentiel à symétrie axiale par rapport à θ en coordonnée cartésienne est donnée par :

$$V = -Z \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} + \frac{1}{2} Q \frac{1}{x^2+y^2} \quad (3.1)$$

Où : Z et Q sont des constantes ($Z > 0$, $Q > 0$).

Et en coordonnées sphériques ce potentiel s'écrit en fonction d'un potentiel central plus une partie dépendante de θ comme suit :

$$V(r, \theta) = V(r) + \frac{1}{r^2} V(\theta) \quad (3.2)$$

Où : $V(r)$ est un potentiel à symétrie central.

Nous choisissons ici de résoudre l'équation de Schrödinger pour un potentiel non central donné par :

$$V(r, \theta) = \frac{\alpha}{r} + \frac{\beta}{r^2 \sin^2 \theta} + \gamma \frac{\cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \quad (3.3)$$

Où α , β et γ sont des constantes réelles.

Ce potentiel a été proposé par Makarov et autres [20]. Ce potentiel peut être utilisé dans la chimie quantique et la physique nucléaire pour décrire les molécules en forme d'anneau, comme le benzène (C_6H_6) et les interactions entre les paires déformées des noyaux.

3. L'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques pour un potentiel non central :

L'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques à la présence d'un potentiel non central sous la forme (3.3) est donnée par :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \Psi(r, \theta, \varphi) + \left(\frac{\alpha}{r} + \frac{\beta}{r^2 \sin^2 \theta} + \gamma \frac{\cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \right) \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.4)$$

Où μ est la masse.

4. Séparation des variables :

En utilisant la méthode de séparation des variables la fonction d'onde psy peut être écrite sous la forme :

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (3.5)$$

Dans laquelle $R(r)$ est la fonction d'onde radiale et $Y(\theta, \varphi)$ représente la partie angulaire.

D'après la séparation dans (3.5) ; l'équation (3.4) devient :

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{Y(\theta, \varphi)}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) + \frac{R(r)}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y(\theta, \varphi) \right) + \frac{R(r)}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} Y(\theta, \varphi) \right) + \\ & \left(\frac{\alpha}{r} + \frac{\beta}{r^2 \sin^2 \theta} + \gamma \frac{\cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \right) R(r)Y(\theta, \varphi) = ER(r)Y(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (3.6)$$

On a multiplié l'équation (3.6) par $\left(-\frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{r^2}{R(r)Y(\theta, \varphi)} \right)$ l'équation (3.6) devient :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) + \frac{1}{Y(\theta, \varphi) \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y(\theta, \varphi) \right) + \frac{1}{Y(\theta, \varphi) \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} Y(\theta, \varphi) - \frac{2\mu\alpha r}{\hbar^2} - \\ & \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{\beta}{\sin^2 \theta} + \gamma \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} Er^2 = 0 \end{aligned} \quad (3.7)$$

Qui peut être écrite :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) - \frac{2\mu\alpha r}{\hbar^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} Er^2 \\ & = \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{\beta}{\sin^2 \theta} + \gamma \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \right) - \frac{1}{Y(\theta, \varphi) \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y(\theta, \varphi) \right) - \frac{1}{Y(\theta, \varphi) \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} Y(\theta, \varphi) = \omega \end{aligned} \quad (3.8)$$

Maintenant, On peut facilement confirmer que l'équation de Schrödinger (3.8), réduite à deux équations différentielles ordinaires. L'une est l'équation radiale pour une particule plongée dans le champ de Coulomb ; et l'autre représente la partie angulaire :

$$\frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) - \frac{2\mu\alpha r}{\hbar^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} Er^2 = \omega \quad (3.9)$$

$$\frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{\beta}{\sin^2 \theta} + \gamma \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \right) - \frac{1}{Y(\theta, \varphi) \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y(\theta, \varphi) \right) - \frac{1}{Y(\theta, \varphi) \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} Y(\theta, \varphi) = \omega \quad (3.10)$$

Où ω est une constante.

On multiplie (3.9) par $\left(\frac{R(r)}{r^2}\right)$ et (3.10) par $(-\sin^2 \theta Y(\theta, \varphi))$; les deux équations devient :

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - \frac{\alpha}{r} - \frac{\hbar^2 \omega}{2\mu r^2} \right) R(r) = 0 \quad (3.11)$$

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dY(\theta, \varphi)}{d\theta} \right) + \frac{d^2 Y(\theta, \varphi)}{d\varphi^2} + \left(\omega \sin^2 \theta - \frac{2\mu}{\hbar^2} (\beta + \gamma \cos \theta) \right) Y(\theta, \varphi) = 0 \quad (3.12)$$

L'équation (3.11) est une équation différentielle de deuxième degré, elle représente la forme finale de la partie radiale de l'équation de Schrödinger avec un potentiel non central.

On peut utiliser à nouveau la méthode de séparation des variables pour simplifier la partie angulaire (3.12), on pose:

$$Y(\theta, \varphi) = H(\theta)\Phi(\varphi) \quad (3.13)$$

L'équation (3.12) devient :

$$\frac{1}{H(\theta)} \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dH(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} (\beta + \gamma \cos \theta) + \omega \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = m^2 \quad (3.14)$$

Donc on arrive aux équations suivantes :

$$\frac{1}{H(\theta)} \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dH(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} (\beta + \gamma \cos \theta) + \omega \sin^2 \theta = m^2 \quad (3.15)$$

$$-\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = m^2 \quad (3.16)$$

Où m^2 est constant.

Après simplification deux dernières équations on obtient:

$$\frac{d^2 H(\theta)}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{dH(\theta)}{d\theta} + \left[\omega - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{\beta + \gamma \cos \theta}{\sin^2 \theta} \right) \right] H(\theta) = 0 \quad (3.17)$$

$$\frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} + m^2 \Phi(\varphi) = 0 \quad (3.18)$$

Il est facile à intégrer la partie azimutal (3.18) est le résultat obtenu bien connu est :

$$\Phi_m(\varphi) = A e^{im\varphi}, \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (3.19)$$

Où : A une constante $\left(A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)$.

Les équations (3.11) et (3.17) qui sont les deux de deuxième degré seront résolues en employant la méthode de Nikiforov-Uvarov.

5. Solutions de l'équation radiale et angulaire par la méthode du Nikiforov-Uvarov:

5.1. La partie radiale :

Pour résoudre l'équation (3.11), supposons le changement de fonction suivant :

$$R(r) = \left(\frac{1}{r}\right) F(r) \quad (3.20)$$

Donc :

$$\frac{dR(r)}{dr} = -\frac{1}{r^2} F(r) + \frac{1}{r} F'(r)$$

Et :

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} = \frac{1}{r} F''(r) - \frac{2}{r^2} F'(r) + \frac{2}{r^3} F(r)$$

D'après les deux dernières équations, l'équation (3.11) devient :

$$F''(r) + \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} E - \frac{2\mu \alpha}{\hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) F(r) = 0 \quad (3.21)$$

On pose :

- $\frac{2\mu}{\hbar^2} E = -\varepsilon^2$; $\omega = l(l+1)$.
- $\frac{2\mu}{\hbar^2} \alpha = b^2$; $\alpha = -Ze^2$.

Le remplacement de ces expressions dans (3.21), nous permet d'écrire :

$$F''(r) + \frac{1}{r^2} (-\varepsilon^2 r^2 - b^2 r - \omega) F(r) = 0 \quad (3.22)$$

C'est une équation du type hypergéométrique ; donc on peut appliquer la méthode de NU.

En comparant l'équation (3.22) avec (2.1), nous obtenons :

$$\tilde{\tau} = 0 \qquad \sigma = r \qquad \tilde{\sigma} = -\varepsilon^2 r^2 - b^2 r - \omega .$$

5.1.1. Spectre d'énergie :

L'application de la méthode de Nikiforov-Uvarov, nous permet de définir le polynôme $\pi(r)$ à partir de l'équation (2.19) comme suit :

$$\pi = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\varepsilon^2 r^2 + (b^2 + k)r + \omega + \frac{1}{4}} \quad (3.23)$$

Où la valeur de k peut être trouvée, on imposant la condition que l'expression sous la racine carrée doit être un carré de polynôme de degré 1 et donc le discriminant de l'expression sous la racine est nulle.

$$\Delta = (b^2 + k)^2 - 4(\varepsilon^2) \left(\omega + \frac{1}{4} \right) = 0$$

Il y a deux solution pour k :

$$k_{\pm} = -b^2 \pm 2\sqrt{\varepsilon^2} \left(l + \frac{1}{2} \right) \quad (3.24)$$

Alor l'équation (3.23) devient :

$$\pi = \begin{cases} \frac{1}{2} \pm \left\{ \sqrt{\varepsilon^2} r + \left(l + \frac{1}{2} \right) \right\}; \text{ pour } k = -b^2 + 2\sqrt{\varepsilon^2} \left(l + \frac{1}{2} \right) \\ \frac{1}{2} \pm \left\{ \sqrt{\varepsilon^2} r - \left(l + \frac{1}{2} \right) \right\}; \text{ pour } k = -b^2 - 2\sqrt{\varepsilon^2} \left(l + \frac{1}{2} \right) \end{cases} \quad (3.25)$$

Où $\tau(s)$ est un polynôme au plus de degré 1, comme définie dans (2.9), on trouve :

$$\tau(s) = 2[(l + 1) - \sqrt{\varepsilon^2} r] \quad (3.26)$$

Et son dérivé doit être négatif, la valeur de $\pi(r)$ adaptée pour notre calculs est :

$$\pi = \frac{1}{2} - \left\{ \sqrt{\varepsilon^2} r - \left(l + \frac{1}{2} \right) \right\} \quad \text{Et} \quad k = -b^2 - 2\sqrt{\varepsilon^2} \left(l + \frac{1}{2} \right). \quad (3.27)$$

Pour déterminer les valeurs propres(λ), nous utilisons l'équation (2.18), on obtient :

$$\lambda = -b^2 - 2\sqrt{\varepsilon^2}(l + 1) \quad (3.28)$$

D'autre part, il y a une autre définition de λ_N dans l'équation (2.22) :

$$\begin{aligned} \lambda_N &= -N\tau' \\ \lambda_N &= 2N\sqrt{\varepsilon^2} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Par comparaison des deux équations (3.28) et (3.29). Les énergies propres de la partie radiale de l'équation de Schrödinger pour le potentiel non central sont donnée par :

$$E_N = -\frac{\mu Z^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{2(N+l+1)^2} \quad (3.30)$$

Où on a remplacé ($-\varepsilon^2$) par son expression.

5.1.2. Fonctions d'onde:

Premièrement on cherche la fonction ϕ , en substituant $\pi(r)$ et $\sigma(r)$ dans l'expression (2.7) on obtient :

$$\phi(r) = r^{l+1} e^{-\sqrt{\varepsilon^2} r} \quad (3.31)$$

Et à partir de l'expression (2.25), la fonction poids s'écrit comme suit :

$$\rho(r) = r^{2l+1} e^{-\sqrt{\varepsilon^2} r} \quad (3.32)$$

Substituant dans la formule de Rodrigues (2.23), les fonctions propres sont données par la forme suivante:

$$Y_n(r) = B_n (r\sqrt{\varepsilon^2})^{-(2l+1)} e^{\sqrt{\varepsilon^2} r} \frac{d^n}{dr^n} \left((r\sqrt{\varepsilon^2})^{n+2l+1} e^{-\sqrt{\varepsilon^2} r} \right) \quad (3.33)$$

Où B_n est une constante de normalisation donnée par :

$$B_n = \frac{1}{n!} \frac{1}{(\sqrt{\varepsilon^2})^{-(2l+1)}}$$

Les solutions des polynômes $Y_n(r)$ dans l'équation (3.33) sont exprimées en termes de polynômes de Laguerre associés [25], qui sont des polynômes orthogonaux, donc :

$$Y_n(r) = L_N^{2l+1}(\sqrt{\varepsilon^2}r)$$

En combinant les polynômes de Laguerre associés et $\phi(r)$ dans l'équation (2.2), les fonctions d'onde radiales sont données sous forme:

$$F_{Nl}(r) = \phi(r)Y_n(r) \quad (3.34)$$

Maintenant, on écrit F en fonction de z ; Où $z = \text{cts } r$; comme suit :

$$z = \frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2(N+l+1)} r$$

C'est-à-dire :

$$F_{Nl}(z) = C_{Nl} z^{l+1} e^{-(z/2)} L_N^{2l+1}(z) \quad (3.35)$$

Où C_{Nl} est la constante de normalisation, déterminée par la condition : $\int_0^\infty F_{Nl}^2(r) dr = 1$;

$$C_{Nl} = \left(\frac{\mu Ze^2}{\hbar^2 n'} \right)^{1/2} \left(\frac{(n'-l-1)!}{n' \Gamma(n'+l+1)} \right)^{1/2}$$

Ainsi, les fonctions d'onde normalisées correspondantes sont révélées:

$$F_{n'l}(r) = \left(\frac{\mu Ze^2}{\hbar^2 n'} \right)^{1/2} \left(\frac{(n'-l-1)!}{n' \Gamma(n'+l+1)} \right)^{1/2} \left(\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2 n'} \right)^{l+1} r^{l+1} \exp\left(-\frac{\mu Ze^2}{\hbar^2 n'} r\right) L_{n'-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2 n'} r\right) \quad (3.36)$$

Avec : $n' = N + l + 1$

On remarque que la fonction d'onde vérifie les conditions au limites ;

$$F(r = 0) = F(r = \infty) = 0 \quad (3.37)$$

5.2. La partie angulaire :

Revenant maintenant à la partie angulaire de l'équation de Schrödinger (3.17), on utilise la même procédure employée pour résoudre la partie radiale dans la section (5.1).

Premièrement on introduit le changement de variable suivant : $\cos \theta = x$

C'est-à-dire $H(\theta) \rightarrow H(\cos \theta) = H(x)$

Donc :

$$\frac{dH(\theta)}{d\theta} = \frac{dH}{dx} \frac{dx}{d\theta} = -\sin \theta \frac{dH(x)}{dx} = -\sqrt{1-x^2} \frac{dH(x)}{dx} \quad (3.38)$$

Avec : $\left(\frac{dx}{d\theta} = -\sin \theta\right)$ et $(\sin \theta = \sqrt{1-x^2})$

Et

$$\frac{d^2H(\theta)}{d\theta^2} = (1-x^2) \frac{d^2H(x)}{dx^2} - x \frac{dH(x)}{dx} \quad (3.39)$$

On remplace (3.38) et (3.39) dans l'équation (3.17) on obtient :

$$\frac{d^2H(x)}{dx^2} - \frac{2x}{1-x^2} \frac{dH(x)}{dx} + \left(\frac{\omega(1-x^2) - m^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2}(\beta + \gamma x)}{(1-x^2)^2} \right) H(x) = 0 \quad (3.40)$$

En comparant (3.40) avec l'équation (2.1) et on utilise le système d'unité ($\hbar = 2\mu = 1$) ; On obtient les expressions des polynômes suivantes:

$$\tilde{\tau} = -2x \quad ; \quad \sigma = 1 - x^2 \quad ; \quad \tilde{\sigma} = -\omega x^2 - \gamma x + (\omega - m^2 - \beta)$$

5.2.1. Spectre d'énergie :

On met les expressions de $\tilde{\tau}$, σ et $\tilde{\sigma}$ dans l'équation (2.20), la fonction $\pi(x)$ devient :

$$\pi = \pm \sqrt{(\omega - k)x^2 + \gamma x - (\omega - m^2 - \beta - k)} \quad (3.41)$$

Selon la méthode de NU, l'expression sous la racine carrée doit être un carré d'un polynôme de premier degré et pour déterminer la constante k on pose le discriminant de l'expression sous la racine est nulle :

$$\Delta = \gamma^2 - 4[(\omega - k)(-\omega + m^2 + \beta + k)] = 0$$

Donc la constant(k), ses racines doubles($k_{\pm} = \frac{2\omega - m^2 - \beta}{2} \pm \frac{1}{2}u$).

Avec : $u = \sqrt{(m^2 + \beta)^2 - \gamma^2}$

Substitution K_{\pm} dans l'équation (3.41) ; les solutions sont obtenues pour $\pi(x)$ est :

$$\pi = \pm \begin{cases} x \sqrt{\frac{m^2 + \beta + u}{2}} + \sqrt{\frac{m^2 + \beta - u}{2}}, \text{ pour } k_- = \frac{2\omega - m^2 - \beta}{2} - \frac{1}{2}u \\ x \sqrt{\frac{m^2 + \beta - u}{2}} + \sqrt{\frac{m^2 + \beta + u}{2}}, \text{ pour } k_+ = \frac{2\omega - m^2 - \beta}{2} + \frac{1}{2}u \end{cases} \quad (3.42)$$

Le polynôme τ comme défini dans (2.9) par : ($\tau = \tilde{\tau} + 2\pi$) doit être choisi de tel sorte que ça dérivée soit négatif, donc:

$$\pi = -x \sqrt{\frac{m^2 + \beta + u}{2}} + \sqrt{\frac{m^2 + \beta - u}{2}} \quad \text{Pour } \left(k_- = \frac{2\omega - m^2 - \beta}{2} - \frac{1}{2}u \right) \quad (3.43)$$

Par conséquent :

$$\tau = -2x \left(1 + \sqrt{\frac{m^2 + \beta + u}{2}} \right) - 2 \sqrt{\frac{m^2 + \beta - u}{2}} \quad (3.44)$$

$$\text{Donc : } \tau' = -2 \left(1 + \sqrt{\frac{m^2 + \beta + u}{2}} \right) \quad (3.45)$$

À partir de π' et τ' ; les valeurs de λ dans (2.18) et (2.22) respectivement sont données par :

$$\lambda = \frac{2\omega - m^2 - \beta}{2} - \frac{1}{2}u - \sqrt{\frac{m^2 + \beta + u}{2}} \quad (3.46)$$

$$\lambda_n = 2n \left(1 + \sqrt{\frac{m^2 + \beta + u}{2}} \right) + n(n - 1) \quad (3.47)$$

En assimilant l'équation (3.46) avec l'équation (3.47), on a :

$$(2n + 1) \sqrt{\frac{m^2 + \beta + u}{2}} + \frac{u - (m^2 + \beta)}{2} + n(n + 1) = \omega - (m^2 + \beta) \quad (3.48)$$

Et en utilisant le fait que $(\omega = l(l + 1))$, on obtient la valeur de l sous la forme :

$$l = \sqrt{\frac{m^2 + \beta + \sqrt{(m^2 + \beta)^2 - \gamma^2}}{2}} + n \quad (3.49)$$

On substitue l'équation (3.49) ; dans l'expression du spectre de l'énergie de la partie radiale (3.30), on trouve finalement l'expression du spectre d'énergie pour le système en considération:

$$E_N = -\frac{\mu Z^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{2 \left(N + \sqrt{\frac{m^2 + \beta + \sqrt{(m^2 + \beta)^2 - \gamma^2}}{2}} + n + 1 \right)^2} \quad (3.50)$$

5.2.2. Fonction d'onde :

On pose les changements suivant : $B = \sqrt{\frac{m^2 + \beta + u}{2}}$ et $C = \sqrt{\frac{m^2 + \beta - u}{2}}$ et on calcule les fonctions

$\phi(x)$, $\rho(x)$ et $Y_n(x)$ à partir des équations (2.7), (2.25) et (2.23) respectivement.

La première partie de la fonction d'onde est déterminée par la relation suivant :

$$\int \frac{\phi'}{\phi} dx = \int \frac{-Bx+C}{1+x^2} dx \quad (3.51)$$

Donc :

$$\phi = (1 - x)^{(B+C)/2} (1 + x)^{(B-C)/2} \quad (3.52)$$

D'autre part on cherche une solution pour (Y_n) . Nous devons d'abord obtenir la fonction poids ρ solution de l'équation (2.25).

$$\frac{\rho'}{\rho} = -2 \left(\frac{Bx+C}{1-x^2} \right) \quad (3.53)$$

C'est-à-dire ρ à la forme logarithmique donnée par la relation :

$$\ln \rho = \ln \left[(1 - x^2)^B \left(\frac{x+1}{x-1} \right)^{-C} \right] \quad (3.54)$$

Donc l'expression finale de ρ donnée par :

$$\rho = (1 - x^2)^B \left(\frac{x+1}{x-1}\right)^{-C} \quad (3.55)$$

Substituant ρ dans l'équation (2.23) nous permet d'obtenir le polynôme Y_n qui s'écrit comme suit :

$$Y_n = B_n (1 - x)^{-(B+C)} (1 + x)^{-(B-C)} \frac{d^n}{dx^n} [(1 + x)^{n+B-C} (1 - x)^{n+B+C}] \quad (3.56)$$

Avec B_n une constante de normalisation donnée par $B_n = \frac{(-1)^n}{2^n n!}$; Y_n devient :

$$Y_n = P_n^{(B+C, B-C)}(x) \quad (3.57)$$

Où : $P_n^{(B+C, B-C)}(x)$ sont les polynômes de Jacobi.

En utilisant (3.52) et (3.57) dans la formule de la fonction d'onde (2.2), on obtient les fonctions d'ondes de la partie angulaire:

$$H_n(x) = N_n (1 - x)^{(B+C)/2} (1 + x)^{(B-C)/2} P_n^{(B+C, B-C)}(x) \quad (3.58)$$

Où la constante de normalisation (N_n) a été calculée à partir de la condition $\int_{-1}^{+1} (H_n(x))^2 dx = 1$ et en utilisant la relation d'orthogonalité des polynômes de Jacobi [22, 23,25], la constante de normalisation N_n est :

$$N_n = \sqrt{\frac{(2n + 2B + 1)\Gamma(n + 1)\Gamma(n + 2B + 1)}{2^{2B+1}\Gamma(n + B + C + 1)\Gamma(n + B - C + 1)}}$$

Donc l'équation (3.58) devient :

$$H_n(\cos \theta) = \sqrt{\frac{(2n+2B+1)\Gamma(n+1)\Gamma(n+2B+1)}{2^{2B+1}\Gamma(n+B+C+1)\Gamma(n+B-C+1)}} (1 - \cos \theta)^{(B+C)/2} (1 + \cos \theta)^{(B-C)/2} P_n^{(B+C, B-C)}(\cos \theta) \quad (3.59)$$

Et par conséquent, les fonctions d'onde totale figurant dans (3.5) à partir de (3.19) ;(3.26) et (3.59) s'écrit comme :

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} F(r) H(\cos \theta) \Phi(\varphi) \quad (3.60)$$

$$\begin{aligned} \text{Donc : } \Psi(r, \theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{(2n+2B+1)\Gamma(n+1)\Gamma(n+2B+1)}{2^{2B+1}\Gamma(n+B+C+1)\Gamma(n+B-C+1)}} \\ &\times \left(\frac{\mu Z e^2}{\hbar^2 n'}\right)^{1/2} \left(\frac{(n'-l-1)!}{n'\Gamma(n'+l+1)}\right)^{1/2} \left(\frac{2\mu Z e^2}{\hbar^2 n'}\right)^{l+1} r^l \exp\left(-\frac{\mu Z e^2}{\hbar^2 n'} r\right) L_{n'-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2\mu Z e^2}{\hbar^2 n'} r\right) \\ &\times (1 - \cos \theta)^{(B+C)/2} (1 + \cos \theta)^{(B-C)/2} P_n^{(B+C, B-C)}(\cos \theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (3.61) \end{aligned}$$

6- Cas particulier : potentiel de Hartmann en forme d'anneau:

Le potentiel de Hartmann repris est un cas particulier du potentiel non central (3.3) qui s'obtient lorsque $\gamma = 0$:

$$V_H(r, \theta) = \eta \xi^2 \varepsilon_0 \left(\frac{2a}{r} - \frac{q\eta a^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right) \quad (3.62)$$

Où a et ε_0 sont respectivement ; le rayon de Bohr et l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène ($a = \hbar^2 / \mu e^2$) ; ($\varepsilon_0 = -\mu e^4 / 2 \hbar^2$)

Et η et ξ sont des paramètres adimensionnels positifs qui vont de 1 à 10 dans les applications de la chimie théorique et q est un paramètre réel.

Donc dans ce cas, si on compare le potentiel de Hartmann (3.62) avec la formule générale d'un potentiel non-centrale donnée dans l'équation (3.3), on trouve les expressions de (α), (β) et (γ) comme suit:

$$\begin{cases} \alpha = -\eta \xi^2 e^2 \\ \beta = \frac{q\eta^2 \xi^2 \hbar^2}{2\mu} \\ \gamma = 0 \end{cases} \quad (3.63)$$

En utilisant (3.63) dans (3.50) ; la relation du spectre d'énergie d'un potentiel de Hartmann est donnée par :

$$E_N = -\frac{\mu(\eta \xi^2)^2 e^4}{2\hbar^2 \left(N + \sqrt{m^2 + \frac{q\eta^2 \xi^2 \hbar^2}{2\mu} + n+1} \right)^2} \quad (3.64)$$

La solution de la partie radiale donnée dans (3.36) reste la même pour le potentiel de Hartmann ; où $Z = \eta \xi^2$, qui est bien expliqué dans [15, 18, 24].

C'est-à-dire :

$$F_{n'l}(r) = \left(\frac{\mu\eta\xi^2 e^2}{\hbar^2 n'}\right)^{1/2} \left(\frac{(n'-l-1)!}{n'\Gamma(n'+l+1)}\right)^{1/2} \left(\frac{2\mu\eta\xi^2 e^2}{\hbar^2 n'}\right)^{l+1} r^{l+1} \exp\left(-\frac{\mu\eta\xi^2 e^2}{\hbar^2 n'} r\right) L_{n'-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2\mu\eta\xi^2 e^2}{\hbar^2 n'} r\right) \quad (3.65)$$

Mais pour la partie angulaire, en utilisant la relation (3.63), les paramètres u , B et C prennent les formes :

- $u = m^2 + \beta$
- $B = \sqrt{m^2 + \beta}$.
- $C = 0$.

La fonction d'onde de la partie angulaire d'après (3.59) est:

$$H_n(\cos \theta) = N_n (\sqrt{1 - \cos^2 \theta})^B P_n^{(B,B)}(\cos \theta) \quad (3.66)$$

On pose ($m' = B$)

On trouve :

$$H_n(\cos \theta) = \sqrt{\frac{(2n+2m'+1)\Gamma(n+1)\Gamma(n+2m'+1)}{2^{2m'+1}(2\Gamma(n+m'+1))}} (\sin \theta)^{m'} P_n^{(m',m')}(\cos \theta) \quad (3.67)$$

On a une relation entre les polynômes ultrasphériques (de Gegenbauer) et les polynômes de Jacobi ; donnée sous forme générale comme [25]:

$$P_n^{(\bar{\lambda})}(\cos \theta) = \frac{\Gamma(\bar{\lambda} + \frac{1}{2})\Gamma(n+2\bar{\lambda})}{\Gamma(2\bar{\lambda})\Gamma(n+\bar{\lambda} + \frac{1}{2})} P_n^{(\bar{\lambda}-\frac{1}{2}, \bar{\lambda}-\frac{1}{2})}(\cos \theta) \quad (3.68)$$

Donc $P_n^{(m',m')}(\cos \theta)$ est donnée en termes des polynômes ultrasphériques comme suit :

$$P_n^{(m',m')}(\cos \theta) = \frac{\Gamma(2m'+1)\Gamma(n+m'+1)}{\Gamma(m'+1)\Gamma(n+2m'+1)} P_n^{(\bar{\lambda})}(\cos \theta) \quad (3.69)$$

En utilisant la définition des polynômes ultrasphériques [25]:

$$P_n^{(\bar{\lambda})}(x) = \sum_{\nu=0}^{n/2} (-1)^\nu \frac{\Gamma(n-\nu+\bar{\lambda})}{\Gamma(\bar{\lambda})\nu!(n-2\nu)!} (2x)^{n-2\nu}$$

Où : $\bar{\lambda} = (l - \nu + 1)$ et on pose $l = n + m'$; (3.69) devient :

$$P_n^{(m',m')}(cos \theta) = \frac{\Gamma(2m'+1)\Gamma(l+1)}{\Gamma(m'+1)\Gamma(l+m'+1)} \sum_{\nu=0}^{(l-m'/2)} (-1)^\nu \frac{\Gamma(2l-2\nu-m'+1)}{\Gamma(l-\nu+1)\nu!(l-m'-2\nu)!} (2 cos \theta)^{l-m'-2\nu} \quad (3.70)$$

Donc on obtient l'équation (3.67) devient:

$$H_{lm'}(cos \theta) = \sqrt{\frac{(2n+2m'+1)n!}{2\Gamma(n+2m'+1)}} (sin \theta)^{m'} \sum_{\nu=0}^{(l-m'/2)} (-1)^\nu \frac{\Gamma(2l-2\nu-m'+1)}{2^l \Gamma(l-\nu+1)\nu!(l-m'-2\nu)!} (cos \theta)^{l-m'-2\nu} \quad (3.71)$$

Est l'équation qui représente les fonctions d'onde de la partie angulaire de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Hartmann.

En combinant entre (3.19), (3.65) et (3.71) on obtient la fonction d'onde finale pour le potentiel de Hartmann en forme d'anneau:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{\mu\eta\xi^2 e^2}{\hbar^2 n'}\right)^{1/2} \left(\frac{(n'-l-1)!}{n' \Gamma(n'+l+1)}\right)^{1/2} \left(\frac{2\mu\eta\xi^2 e^2}{\hbar^2 n'}\right)^{l+1} r^l \exp\left(-\frac{\mu\eta\xi^2 e^2}{\hbar^2 n'} r\right) L_{n'-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2\mu\eta\xi^2 e^2}{\hbar^2 n'} r\right) \sqrt{\frac{(2n+2m'+1)n!}{2\Gamma(n+2m'+1)}} (sin \theta)^{m'} \sum_{\nu=0}^{(l-m'/2)} (-1)^\nu \frac{\Gamma(2l-2\nu-m'+1)}{2^l \Gamma(l-\nu+1)\nu!(l-m'-2\nu)!} (cos \theta)^{l-m'-2\nu} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (3.72)$$

Qui est en accord avec les résultats obtenus dans [24].

7. Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons donnée les solutions exactes des parties radiale et angulaire de l'équation de Schrödinger pour un potentiel non central. Les énergies propres et les fonctions d'onde correspondantes sont obtenues en utilisant la méthode de Nikiforov-Uvarov.

Les fonctions d'onde sont exprimées en termes des polynômes de Laguerre associé et de Jacobi pour la partie radiale et angulaires respectivement. On voit que la méthode de (NU) est un outil applicable pour donner les solutions exactes pour les problèmes non centrales. Le potentiel de Hartmann à été considéré comme vérifications directe des résultats obtenus, en effet il représente un cas particulier qui s'obtient lorsque la constante (γ) est nulle.

Conclusion

Dans ce mémoire, après avoir donné un aperçu générale sur la mécanique classique et l'apparition de l'équation de Schrödinger, on a présenté en détail un modèle mathématique très intéressant et qui montre des succès successives quand il est utilisé pour traiter analytiquement pas mal de problèmes de la physique théorique surtout dans les dernières années ; c'est la méthode de Nikiforov-Uvarov. Et enfin nous avons appliqué cette méthode dans un cas stationnaire peu compliqué avec un système à symétrie axiale (non central).

Dans cette partie nous allons donner nos conclusions sur la méthode utilisée et sur les résultats obtenus.

- La méthode de séparations des variables nous permet d'écrire deux équations différentielles l'une radiale et l'autre angulaire.
- En appliquant la méthode de Nikiforov-Uvarov dans le troisième chapitre on a pu tirer le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes de la partie radiale.
- La partie angulaire a été aussi résolue par cette méthode, elle nous fournit une condition sur le nombre quantique l (3.49).
- Le spectre d'énergie du système et la fonction d'onde complètement orthonormalisées sont finalement bien définies dans les formules (3.50) et (3.61).
- Le potentiel en forme d'anneau de Hartmann représente un cas particulier du problème étudié et qui s'obtient quand $(\alpha = -\eta\xi^2 e^2, \beta = \frac{q\eta^2 \xi^2 \hbar^2}{2\mu}, \gamma = 0)$ et donc justifié nos résultats.
- La méthode de Nikiforov-Uvarov représente un outil mathématique très fort et montre sa validité encore dans notre travail.
- L'utilisation de cette méthode paraît très simple que plusieurs d'autres méthodes grâce à sa formulation mathématique simple.

Références Bibliographiques

- [1] C. Chauvin, J. Math : Les ondelettes comme fonctions de base dans le calcul de structures électroniques, I. N. Pol. De Grenobl, 2005.
- [2] Nikiforov A.F., Uvarov V.B., 1988, *Special Functions of Mathematical Physics* (Birkhauser, Basel).
- [3] Ch. Duval, Mécanique Du Solide et Mécanique Analytique, Décembre 2008.
- [4] C. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique quantique T2, (Hermann, Paris, 2007).
- [5] M. Bender, P. H. Heenen, and P. G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. 75, 121,2003.
- [6] J.V. Lill, G.A. Parker, and J.C. Light, Chem. Phys. Lett. 89, 483 (1982); J. Chem. Phys.85, 900 (1986).
- [7] S. L. Altmann, C. J. Bradley, Proc. Phys. Soc. London 86, 915 ,1965.
- [8] H Salehi, 2011, SciRes App. Math. 2 999-1004 doi :10.4236/am.2011.28138.
- [9]M. Kossow; Annal. Phys: Quantum field theory and composite fermions in the fractional quantum Hall Effect, 18N5; 285-377, 2009.
- [10] J.W.DETTAM, Applied complex Variables, Dover publications Inc., NEW YORK, 1984.
- [11] R. M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [12] F.Yasuk, C.Berkdemir, and A Berkdemir, and C Onem 2005 *Phys. Scr.* **71** 472
- [13] R.Shankar.,1994,1980,Principes of Quantum Mechanics,(Plenum Press ,New York).
- [14] S,im,sek M. and Egrifes H., 2004, J. Phys. A 37 4379.
- [15] Gönül B., Zorba İ., 2000, Phys. Lett. A **269** 83.
- [16] Dutt R., Gangopadhyaya A., Sukhatme U. P., 1997, Am. J. Phys. **65** 400.
- [17] Mandal B. P., Path Integral Solution of Non-central Potential, 1999, Preprint, quant-ph/9906028.
- [18] Chen C. - Y., Liu C.-L., Sun D.-S., 2002, Phys. Lett. A **305** 341 .

[19] Chen C.- Y., Sun D.-S., Liu C.-L., 2003, Phys.Lett. A **317** 80 .

[20] Makarov A. A., et al ., 1967, Nuovo Cim

[21] Szego G., 1939, Orthogonal Polynomials, (American Mathematical Society, New York).ento A **52** 1061.

[22] Szego G., 1939, Orthogonal Polynomials, (American Mathematical Society, New York).

[23] Lebedev N. N., 1965, Special Functions and Their Applications, (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J.).

[24] Hartmann H., Schuch D., 1980, Int. J. Quantum Chem. 18 125.

[25] W.W.BELL.,1968, Special Functions For Scientists And Engineers,(D. VAN NOSTRAND COMPANY LTD ,London).

Abstract:

In this work, we have presented a rigorous analytic treatment of spineless stationary physical system under the influence of a non central electric potential. Using the Nikiforov Uvarov method, the energy eigen values and also the properly ortho-normalised wave functions of the Schrödinger equation are obtained. The ring shaped Hartman potential represent a particular case of the axially symmetric potential studied and then justify the obtained results.

Keywords: Schrödinger equation, non central potential, Nikiforov-Uvarov method.

Résumé :

Dans ce mémoire, nous avons présenté un traitement analytique d'un problème physique stationnaire sans spin plongé dans un potentiel à symétrie axiale (non central). En utilisant la méthode de Nikiforov-Uvarov, le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'ondes proprement orthonormalisées de l'équation de Schrödinger sont obtenues. Le potentiel de Hartmann représente un cas particulier du potentiel étudié et donc justifier les résultats obtenues.

Mots-clés: équation de Schrödinger, potentiel non central, méthode de Nikiforov-Uvarov.

ملخص:

في هذه المذكرة، قمنا بدراسة تحليلية شاملة ودقيقة لواحدة من مسائل الفيزياء في حالتها المستقرة (غير المتعلقة بالزمن) والتي ليس لها لف مغزلي (سبين) والخاضعة لكمون ذو تناظر محوري (ليس ذو تناظر مركزي). باستخدام طريقة نيكيفوروف أوفاروف تمكنا من إيجاد طيف الطاقة وكذلك دوال الموجة الدقيقة المتعامدة والمنتظمة. يمثل كمون هارتمان حالة خاصة للكمون الذي قمنا بدراسته وبالتالي يمثل دليلا على صحة النتائج المتحصل عليها.

كلمات مفتاحية: معادلة شرودنجر، كمون لا مركزي، طريقة نيكيفوروف-أوفاروف.