

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° :



DOMAINE : Sciences de la matière

FILIERE : PHYSIQUE

OPTION : PHYSIQUE DES

PARTICULES A HAUTE

ENERGIE.....

MEMOIRE

**Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique**

Par:

AOUAMER SOUHILA

THEME

**Solution de l'équation de Schrödinger non
stationnaire pour un potentiel singulier non
central**

Soutenue le 04 / 06 /2017 devant le jury composé de :

S.KALLI	MCB	Univ. de M'siLa	Président
S. MEDJBER	MCB	Univ. de M'siLa	Rapporteur
S.MENOUAR	Prof	Univ. de Sétif	Examineur

Année universitaire : 2016/2017

Remerciements

Je remercie d'abord et avant tout, le 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 tenaient à côté de moi tout au long de mes études.

*Je remercie particulièrement mon encadreur **Mr: S. MEDJBER** pour ses conseils et ses orientations.*

Je remercie également mon mari Redouane, qui a toujours été favorable à moi. Je remercie également mon frère abd elouhabe, qu'a toujours me donné l'aide.

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

Mes remerciements vont aussi à tous les enseignants de département de physique de l'université de M'sila et tous ceux qui ont contribué de près ou de loin, à ma formation scientifique. Et pour tout les membres de la famille Aouamer salahe un par un.

Dédicace

*Je dédie ce modeste travail à toutes les personnes qui
m'ont aidé de le terminer :*

*mes chère parents, que je ne vais jamais oublier leurs
grâces sur moi par leurs supports, leurs
encouragements et surtout leurs prières, mes
frères : abd Elouhabe, yousef, oussama, Mohamed,
mes sœurs : Noura, samira, farida.*

Je dédie aussi ce travail à mon mari Redouane

A tous les familles: Aouamer

*A mes chers amies: Iman, abla, Farida, Amina,
Houda, Hanane , Assia , Inasse, Samia, Sadia,
Donia.*

A mes collègues de promotion 2017

Je dédie ce modeste travail.

Table des matières

Introduction générale.....	03
----------------------------	----

Chapitre 01 : Equation de Schrödinger en coordonnées Sphériques et le

Potentiel non central : 05

1.1	Introduction.....	06
1.2	Le potentiel non central.....	07
1.3	Le moment cinétique en Mécanique quantique.....	08
	1.3.1 Moment cinétique en coordonnées sphérique.....	09
	1.3.1 Expression des operateurs du moment cinétique.....	10
	1.3.2 Propriétés générales des operateurs du moment cinétique.....	11
1.4	La méthode de séparation des variables et l'équation de Schrödinger Coordonnées sphériques.....	11
1.5	Exemples pour des potentiels non centraux.....	14

Chapitre 02 : Equation de Schrödinger non stationnaire et la théorie

d'Invariants : 16

2.1	Méthodes de résolution de l'équation Schrödinger dépendante de temps	16
2.2	La théorie d'invariants.....	16
	2.2.1 Introduction.....	16
	2.2.2 Exposition de la méthode.....	17
	2.2.3 Les valeur propre et les vecteurs propres de l'invariant.....	18
2.3	Solution général.....	20

Chapitre 03: Solution de l'équation de Schrödinger pour un

	Potentiel non central dépendant du temps :	24
3.1	Introduction.....	24
3.2	Opérateur Hamiltonien et construction de l'invariant.....	25
3.3	Solution de la partie radiale de l'équation de Schrödinger.....	29
3.3.1	La méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U).....	29
3.4	Solution de la partie angulaire de l'équation de Schrödinger.....	33
3.4.1	Les concepts de base de la méthode d'itération asymptotique.....	36
3.5	La phase totale et la solution de l'équation de Schrödinger.....	40
	Conclusion :	42
	Bibliographie :	43

Introduction générale

En mécanique quantique, les systèmes non stationnaires sont représentés par un hamiltonien dépendant explicitement du temps, ces systèmes sont difficiles à résoudre exactement, plusieurs méthodes ont été exploitées pour résoudre de tels problèmes, parmi lesquels la méthode des invariants [1].

L'étude des caractéristiques quantiques exactes des systèmes atomiques et moléculaires avec un potentiel non central est un problème très intéressant à la fois en physique théorique et en chimie quantique. Dans la manipulation traditionnelle de la mécanique quantique les valeurs propres et les fonctions propres d'un hamiltonien sont évaluées par la méthode de séparation des variables. Cependant, si l'on veut obtenir des résultats de haute précision dans les recherches scientifiques, une grande partie des descriptions mécaniques des systèmes moléculaires réels doivent être remplies en termes d'un hamiltonien dépendant du temps qui exige des formulations mathématiques plus élaborées au-delà de ces méthodes classiques.

L'équation de Schrödinger non stationnaire est une équation différentielle du deuxième ordre par rapport aux variables spatiales, avec des coefficients dépendantes du temps, la solution de cette équation n'est donc pas toujours facile, les physiciens ont fait beaucoup d'efforts pour trouver des méthodes analytiques pour la résoudre, ils ont réussi à trouver les fonctions d'onde et le spectre d'énergie pour plusieurs types de potentiel et par différentes méthodes mathématiques qui se divisent en deux catégories : les méthodes d'approximation par exemple (l'approximation soudaine [2],...) et les méthodes exactes comme (les transformations unitaires, changement de représentation [3],...).

Dans ce travail, nous avons présenté un traitement analytique d'un problème physique décrit par un potentiel non central dépendant du temps composé d'un oscillateur singulier plus le terme $\frac{1}{r}p_r + p_r\frac{1}{r}$. Pour obtenir les solutions de l'équation de Schrödinger, nous avons utilisé la méthode des invariants. L'opérateur invariant est transformé à un autre invariant plus simple par une transformation unitaire. Les solutions quantiques dans le système transformé sont obtenues facilement parce que l'opérateur invariant dans le système transformé est indépendant du temps. Les méthodes Nikiforov-Uvarov et d'itération asymptotique sont utilisées pour résoudre l'équation aux valeurs propres de l'opérateur invariant dans le système transformé. Le potentiel en forme de double anneau généralisée $V(\varphi)$ dépendant du temps est

Introduction générale

considère comme un cas particulier. Par la transformation inverse des solutions quantiques obtenues dans le système transformé, les solutions quantiques complètes dans le système d'origine sont identifiés.

Ce mémoire est organisé comme suit :

Dans le premier chapitre, on donne une introduction sur la solution de l'équation de Schrödinger stationnaire en coordonnées sphériques en présence d'un potentiel non central.

Le deuxième chapitre est consacré à la théorie des invariants dans son contexte historique et original de Lewis et Riesenfeld [1].

Le troisième chapitre représente l'essentiel de notre travail concernant la solution exacte de l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour un potentiel non central dépendant du temps composé d' un oscillateur singulier plus le terme $\frac{1}{r}p_r + p_r\frac{1}{r}$ en utilisant la théorie des invariant, la transformation unitaire, la méthode de Nikiforov-Uvarov et la méthode d'itération asymptotique. Enfin une conclusion générale termine ce travail.

Chapitre01

Equation de Schrödinger et le potentiel non central

1.1 Introduction

Le grand historique de la naissance de la description quantique de la matière s'est produit lorsque Schrödinger a écrit pour la première fois son équation. Pendant de longues années, la structure atomique interne de la matière était restée un grand mystère. Dans le cadre de la mécanique classique, l'état d'un système physique est bien défini par la connaissance des variables dynamiques du système, solutions des équations de Newton ou celles de Hamilton et Lagrange, qui sont des équations continues d'où la continuité des grandeurs qui déterminent l'état du système tel que l'énergie [4,5]. Alors pour ce faire, il fallait d'abord trouver l'analogie des équations de la mécanique classique, une telle équation, qui ne peut pas être directement déduite d'une manière rigoureuse des anciens principes, mais intuitivement devinée sera l'un des postulats de la théorie [6]. Cette équation c'est celle qu'on appelle aujourd'hui l'équation de Schrödinger.

La découverte par Schrödinger des équations propres du mouvement des électrons à l'échelle atomique a fourni une théorie à partir de laquelle on peut calculer des phénomènes atomiques de façon quantitative, précise et détaillée. En principe, l'équation de Schrödinger permet d'expliquer tous les phénomènes atomiques sauf ceux qui font intervenir le magnétisme et la relativité.

Dans cette théorie, l'étude du mouvement d'un électron ou d'un système atomique quelconque ne doit pas être fondée sur les trajectoires classiques, solutions des équations de Newton, ce mouvement est décrit par une onde associée à l'électron, l'onde de De-Broglie, que définit une fonction complexe des coordonnées d'espace et de temps $\psi(\vec{r}, t)$, solution d'une équation aux dérivées partielles, l'équation de Schrödinger [7] :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi \quad (1.1)$$

L'équation de Schrödinger est une équation aux dérivées partielles, du premier ordre par rapport au temps et du second ordre par rapport aux coordonnées de l'espace à laquelle on doit associer des conditions aux limites convenables. Dans cette équation, l'Hamiltonien $H(t)$ est un opérateur linéaire tiré de la fonction Hamiltonien classique, en y remplaçant la quantité de mouvement \vec{p} par l'opérateur :

$$\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (1.2)$$

Tel que $\vec{\nabla}$ représente l'opérateur de dérivées partielles (nabla). En coordonnées cartésiennes il est défini par :

$$\vec{\nabla} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \quad (1.3)$$

On note que la grandeur E est une valeur propre de l'hamiltonien H qui vérifie l'équation de Schrödinger stationnaire suivante :

$$H \psi = E \psi \quad (1.4)$$

Avec :

$$\psi = \psi(\vec{r}) \quad (1.5)$$

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

1.2 Le potentiel non central

Dans le cas où la particule se déplace dans un potentiel non central, c'est mieux d'utiliser le système de coordonnées sphériques (trois dimensions) pour résoudre l'équation de Schrödinger.

Une question pertinente a été posée d'une façon naturelle : qu'est-ce qu'un potentiel non central ? Pour répondre à cette question il faut définir le potentiel central. En bref, le potentiel central $V(r)$ est un potentiel qui ne dépend que de la distance r à l'origine des coordonnées. Par conséquent cette définition nous permet de dire que le potentiel non central est une fonction qui dépend du rayon r , de l'angle polaire θ , et de l'angle azimutal φ . La dépendance du potentiel non central $V(r, \theta, \varphi)$ en trois variables nous a conduit d'étudier l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques pour donner au lecteur au moins une idée sur ce qui viendra dans la suite de ce chapitre introductif.

Dans ce système nous avons établi la forme générale de l'hamiltonien pour une particule de masse m et d'impulsion p en mouvement dans un potentiel de type non central $V(r, \theta, \varphi)$, et indépendant du temps, donc l'hamiltonien s'écrit sous la forme :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r, \theta, \varphi) \quad (1-6)$$

L'opérateur du moment conjugué dans les coordonnées sphériques est écrit sous la forme :

$$p^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \quad (1-7)$$

Et l'opérateur de dérivées partielles (nabla) en coordonnées sphériques est défini par :

$$\vec{\nabla} = \vec{u}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{u}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{u}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (1-8)$$

Avec :

$$p_r^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (1-9)$$

L : est le moment cinétique.

1.3 Le moment cinétique en Mécanique quantique

Le moment cinétique joue déjà un rôle important soit en mécanique classique ou en mécanique quantique.

En mécanique classique, le moment cinétique $\vec{\ell}$, calculé à l'origine du repère, est défini à partir de vecteur position \vec{r} et de vecteur impulsion \vec{p} , en mécanique quantique, l'opérateur moment cinétique \vec{L} est défini, formellement, à partir de l'opérateur position \vec{r} et de l'opérateur impulsion \vec{p} .

Le moment cinétique d'une particule de masse m , tournant à une vitesse \vec{v} de l'origine O d'un référentiel $R (O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ est défini comme le produit vectoriel :

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} = \begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix} \wedge \begin{vmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{vmatrix} \quad (1.10)$$

On peut ainsi écrire les opérateurs

$$\begin{cases} L_x = y p_z - z p_y \\ L_y = z p_x - x p_z \\ L_z = x p_y - y p_x \\ \text{Avec:} \\ L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \end{cases} \quad (1.11)$$

Les opérateurs L_x, L_y et L_z sont non commutatives, on trouve $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, et ainsi de suite pour les autres commutateurs, ils n'ont donc pas les mêmes fonctions propres, donc on ne peut pas ainsi mesurer simultanément les trois composantes du moment cinétique.

Cependant, le commutateur $[L^2, L_z] = 0$, de même pour les deux autres composantes. L^2 et L_z ont les mêmes fonctions propres.

1.3.1 Moment cinétique en coordonnées sphériques

Au lieu de caractériser le vecteur \vec{r} par ses composantes cartésiennes x, y, z , nous repérons le point M correspondant de l'espace ($\overrightarrow{OM} = \vec{r}$) par ses coordonnées sphériques r, θ, φ (Figure.1).

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (1.12)$$

Avec :

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \tan(\theta) = \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \\ \tan(\varphi) = \frac{y}{x} \end{cases} \quad (1.13)$$

Et

$$\begin{cases} r \geq 0 \\ 0 \leq \theta \leq \pi \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi \end{cases} \quad (1.14)$$

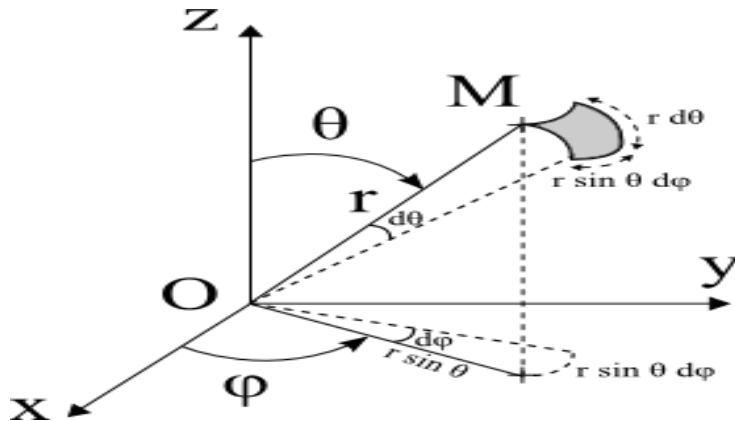


Figure.1 : définition des coordonnées sphériques r, θ, φ d'un point

Dans l'espace

L'élément du volume $d^3r = dx dy dz$ s'écrit en coordonnées sphériques :

$$d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \quad (1.15)$$

$$= r^2 dr d\Omega \quad (1.16)$$

Où :

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi \quad (1.17)$$

$d\Omega$: représente l'élément d'angle solide autour de la direction des angles θ, φ .

1.2.3 Expression des composantes du moment cinétique

Les expressions des composantes du moment cinétique sont données par les formules suivantes :

La composante L_z

On en déduit l'expression de l'opérateur L_z en fonction des coordonnées sphériques par la technique classique du changement de variables. Cet opérateur a une forme simple en coordonnées sphériques :

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (1.18)$$

La composante L_x

Pour exprimer les opérateurs L_x et L_y en coordonnées sphériques, on convert les dérivées partielles par rapport aux coordonnées cartésiennes en coordonnées sphériques. On obtient, ainsi l'expression de L_x comme suit:

$$L_x = -\frac{\hbar}{i} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (1.19)$$

La composante L_y

L'expression de L_y est donnée par :

$$L_y = -\frac{\hbar}{i} \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (1.20)$$

L'opérateur L^2

L'opérateur L^2 est donné par la formule suivante :

$$\begin{aligned} L^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \\ &= -\hbar^2 \mathcal{L}^2 \end{aligned} \quad (1.21)$$

Où

\mathcal{L} : est le moment angulaire qui est donné par :

$$\mathcal{L}^2 = \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) \right] \quad (1.22)$$

1.3.3 Propriétés générales des opérateurs de moment cinétique

Les composantes du moment cinétique orbital, vérifient les relations suivantes :

$$[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \quad (1.23)$$

Avec $i, j, k = \overline{1,2,3}$

$$\begin{cases} [L^2, L_x] = 0 \\ [L^2, L_y] = 0 \\ [L^2, L_z] = 0 \end{cases} \quad (1.24)$$

Notons que les opérateurs H, L^2 et L_z commutent entre eux et ils ont formé un ensemble commun de fonctions propres $\psi(r, \theta, \varphi)$.

$$\begin{cases} [H, L^2] = 0 \\ [H, L_z] = 0 \end{cases} \quad (1.25)$$

1.3 La méthode de séparation des variables et l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques

Pour une particule qui se déplace dans un potentiel non central on choisit le système de coordonnées sphériques pour résoudre l'équation de Schrödinger, pour cette raison on écrit la fonction d'onde en fonction du rayon r et les angles directeurs θ et φ :

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \varphi) \quad (1.26)$$

Et l'équation de Schrödinger stationnaire s'écrit :

$$H \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi) \quad (1.27)$$

E : est l'énergie de système

Et

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r, \theta, \varphi) \quad (1.28)$$

c'est l'Hamiltonien du système.

L'équation (1-27) réécrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r, \theta, \varphi) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi) \quad (1.29)$$

Dans ce système, l'équation de Schrödinger stationnaire devient :

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \hbar^2 \frac{\mathcal{L}^2}{r^2} \right] + V \right\} \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi) \quad (1.30)$$

D'où on est donc ramène à résoudre l'équation suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right) + (V - E) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = 0 \quad (1.31)$$

Généralement on peut écrire la fonction d'onde sous la forme d'un produit d'une fonction radiale $R(r)$ et d'une fonction angulaire $f(\theta, \varphi)$:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) f(\theta, \varphi) \quad (1.32)$$

Nous pouvons toujours supposer que les fonctions $R(r)$ et $f(\theta, \varphi)$ sont normalisées séparément :

$$\int_0^\infty |\Psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi = \int_0^\infty r^2 |R(r)|^2 dr = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta |f(\theta, \varphi)|^2 d\theta = 1 \quad (1.33)$$

Multipliant l'équation. (1.30) par $-\frac{2m}{\hbar^2} \frac{r^2}{Rf}$ on obtient :

$$\frac{r^2}{R} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R + \frac{1}{f} \mathcal{L}^2 f + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) r^2 = 0 \quad (1.34)$$

Cette équation n'est pas toujours séparable, puisque elle dépend de la forme du potentiel, donc, on ne peut pas appliquer la méthode de séparation de variables pour n'importe quel potentiel, mais elle est séparable pour les potentiels de la forme suivant :

$$V(r, \theta, \varphi) = U(r) + \frac{V_1(\theta)}{r^2} + \frac{V_2(\varphi)}{r^2 \sin^2 \theta} \quad (1.35)$$

L'équation (1.34) devient :

$$\frac{r^2}{R} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r))r^2 = -\frac{1}{f} \mathcal{L}^2 f + \frac{2m}{\hbar^2} (V_1(\theta) + \frac{V_2(\varphi)}{\sin^2 \theta}) = c \quad (1.36)$$

Dans ce cas on peut écrire la fonction d'onde $f(\theta, \varphi)$ comme le produit de trois fonctions séparables :

$$f(\theta, \varphi) = g(\theta) h(\varphi), \quad (1.37)$$

on obtient l'équation suivante :

$$\frac{1}{h(\varphi)} \frac{d^2 h(\varphi)}{d\varphi^2} - \frac{V_2(\varphi)}{\hbar^2} = -\frac{\sin^2 \theta}{g(\theta)} \frac{d^2 g(\theta)}{d\theta^2} = -\frac{\sin^2 \theta \cos \theta}{g(\theta)} \frac{dg(\theta)}{d\theta} - c \sin^2 \theta + \frac{\sin^2 \theta}{\hbar^2} V_1(\theta) = -\mu^2 \quad (1.38)$$

avec la condition de normalisation suivante :

$$\int_0^\pi \sin \theta |g(\theta)|^2 d\theta = \int_0^{2\pi} |h(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \quad (1.39)$$

enfin on obtient les trois équations différentielles suivantes :

❖ Equation de Schrödinger radiale :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - U(r) - \frac{\hbar^2 c}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (1.40)$$

❖ Equation de Schrödinger polaire :

$$\left(\frac{d^2}{d\theta^2} g(\theta) + \cot \theta \frac{dg(\theta)}{d\theta} + \left(c - \frac{\mu^2}{\sin^2 \theta} - \frac{V_1(\theta)}{\hbar^2} \right) g(\theta) \right) = 0 \quad (1.41)$$

❖ Equation de Schrödinger azimutale :

$$\frac{d^2 h(\varphi)}{d\varphi^2} + \left(\mu^2 - \frac{V_2(\varphi)}{\hbar^2} \right) h(\varphi) = 0 \quad (1.42)$$

Les fonctions $R(r)$, $g(\theta)$ et $h(\varphi)$ dépendent de la seule variable r , θ et φ

Respectivement.

c, μ : Sont deux constantes de séparation.

avec :

$$c = l(l + 1) \quad , \quad \mu = m \quad (1.43)$$

l et m sont des entiers :

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots \text{ et } m = -l, \dots, +l \quad (1.44)$$

1.5 Exemples pour des potentiels non centraux

Il existe différentes types des potentiels non centraux dans la littérature qu'ils ont été étudiés en utilisant la méthode de séparation de variable. Parmi lesquels on peut citer quelques potentiels :

➤ *Le potentiel de Makarov plus le potentiel de Poschl-Teller [8] :*

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r}, V_1(\theta) = \frac{\beta}{\sin^2 \theta} + \frac{\gamma \cos \theta}{\sin^2 \theta}, V_2(\varphi) = \frac{\alpha}{\cos \gamma \varphi^2} + \frac{\beta}{\sin \gamma \varphi^2} \quad (1.45)$$

➤ *Le potentiel de Makarov [9] :*

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r}, V_1(\theta) = \frac{\beta}{\sin^2 \theta} + \frac{\gamma \cos \theta}{\sin^2 \theta}, V_2(\varphi) = 0 \quad (1.46)$$

➤ *Le potentiel de Kretzer modifié plus le potentiel de la forme d'anneau [10, 4] :*

$$U(r) = D\left(\frac{r-\alpha}{r}\right)^2, V_1(\theta) = \frac{\beta}{\sin^2 \theta} + \frac{\gamma \cos \theta}{\sin^2 \theta}, V_2(\varphi) = 0 \quad (1.47)$$

➤ *Le potentiel de Poschl-Teller plus le potentiel de forme double anneau [6] :*

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r}, V_1(\theta) = \frac{b}{\sin^2 \theta} + \frac{c \cos \theta}{\sin^2 \theta}, V_2(\varphi) = \frac{e}{\cos \vartheta \varphi^2} + \frac{f}{\sin \vartheta \varphi^2} \quad (1.48)$$

Chapitre 02

*Equation de
Schrödinger non
Stationnaire et la
Théorie des invariants*

2.1 Méthodes de résolution de l'équation Schrödinger dépendante du temps

La solution analytique exacte de l'équation de Schrödinger non stationnaire pour des potentiels physiques est très essentielle 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 dépendante du temps, le choix d'une méthode particulière repose généralement sur la forme du potentiel et sur celle de la fonction d'onde recherchée.

Rappelons quelques méthodes fréquemment utilisées [11-13] :

- ❖ La théorie des perturbations dépendante du temps
- ❖ L'approximation soudaine
- ❖ Méthode variationnelle
- ❖ L'opérateur d'évolution
- ❖ Changement de représentation
- ❖ La méthode d'invariant ... etc

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

2.2 La théorie des invariants

2.2.1 Introduction

La théorie des invariants pour des Hamiltonien Hermitiens a été introduite par Lewis et Riesenfeld (1969) [1,10], ou ils ont dérivés une simple relation entre les vecteurs propres 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 est reliée au langage mathématique puissant qui la caractérise, et à sa souplesse dans la solution de l'équation de Schrödinger non stationnaire. Dans cette partie de notre travail, on va donner quelques notions essentielles concernant la théorie des invariants telle qu'elle a été introduite par Lewis et Riesenfeld.

A travers ces notions on peut, au moins, donner aux lecteurs une idée sur l'importance de la théorie des invariants pour la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

La méthode des invariants représente un très fort outil mathématique pour la résolution des 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 non stationnaires de la physique quantique relativiste et non 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 détaille le formalisme mathématique de cette méthode et la manière d'utilisation de cette dernière pour traiter les problèmes de la physique.

2.2.2 Exposition de la méthode

On considère l'équation de Schrödinger suivante :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \quad (2.1)$$

où H est l'Hamiltonien du système, c'est un opérateur dépendant explicitement du temps, et nous supposons l'existence d'un autre opérateur Hermitien, $I(t)$ est dit un invariant s'il satisfait les deux conditions suivantes :

$$\frac{dI(t)}{dt} = \frac{\partial I(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I(t), H(t)] = 0 \quad (2.2)$$

$$I^+(t) = I(t) \quad (2.3)$$

En appliquant l'équation (2.2) sur $|\psi(t)\rangle$ et en utilisant l'équation (2.1), nous obtenons la relation :

$$i\hbar \frac{\partial I(t)}{\partial t} |\psi(t)\rangle + I(t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle - H(t) I(t) |\psi(t)\rangle = 0 \quad (2.4)$$

D'où

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (I(t) |\psi(t)\rangle) = H(t) (I(t) |\psi(t)\rangle) \quad (2.5)$$

Cela veut dire que l'opérateur $I(t)|\psi(t)\rangle$ représente une solution de l'équation de Schrödinger. Ce résultat est valable pour tout invariant.

2.2.3 Les valeurs propres et les vecteurs propres de l'invariant

Comme tout opérateur en mécanique quantique, I ayant des valeurs propres et des vecteurs propres.

On suppose que l'invariant $I(t)$ a un ensemble complet de fonctions propres. Soit λ_n les valeurs propre de $I(t)$ et $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$ ses fonctions propres, où k représente tous les autres nombres quantiques nécessaires pour spécifier les états propres. L'équation aux valeurs propres s'écrit comme :

$$I(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle = \lambda_n|\varphi_{n,k}(t)\rangle \quad (2.6)$$

Avec :

$$\langle\varphi_{n,k}(t)|\varphi_{\dot{n},\dot{k}}(t)\rangle = \delta_{n,\dot{n}}\delta_{k,\dot{k}} \quad (2.7)$$

En vertu de l'équation (2.3), les valeurs propres λ_n sont réelles et indépendantes du temps, comme on peut le déduire facilement en dérivant l'équation (2.6) par rapport au temps,

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t}|\varphi_{n,k}(t)\rangle + I(t)\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_{n,k}(t)\rangle = \frac{\partial \lambda_n}{\partial t}|\varphi_{n,k}(t)\rangle + \lambda_n|\varphi_{n,k}(t)\rangle \quad (2.8)$$

on applique l'équation (2.2) sur l'état propre $\langle\varphi_{n,k}(t)|$, ce qui donne

$$i\hbar\frac{\partial I(t)}{\partial t}\langle\varphi_{n,k}(t)| + I(t)H(t)\langle\varphi_{n,k}(t)| - \lambda_n H(t)\langle\varphi_{n,k}(t)| = 0 \quad (2.9)$$

Le produit scalaire de l'équation (2.9) par un état $\langle\varphi_{n,k}(t)|$ est

$$i\hbar\langle\varphi_{\dot{n},\dot{k}}(t)|\frac{\partial I(t)}{\partial t}|\varphi_{n,k}(t)\rangle + (\lambda_{\dot{n}} - \lambda_n)\langle\varphi_{\dot{n},\dot{k}}(t)|H(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle = 0 \quad (2.10)$$

ce qui implique

$$\langle\varphi_{n,k}(t)|\frac{\partial I(t)}{\partial t}|\varphi_{n,k}(t)\rangle = 0 \quad (2.11)$$

En prenant maintenant le produit scalaire de l'équation (2.8) avec $\langle\varphi_{n,k}(t)|$, on obtient

$$\frac{\partial \lambda_n}{\partial t} = \langle \varphi_{n,k}(t) | \frac{\partial I(t)}{\partial t} | \varphi_{n,k}(t) \rangle = 0 \quad (2.12)$$

Comme les valeurs propres sont indépendantes du temps, il est clair que les états propres doivent être dépendants du temps.

Pour trouver le rapport entre les états propres de $I(t)$ et les solutions de l'équation Schrödinger, Lewis et Riesenfeld ont écrit en premier lieu l'équation du mouvement de $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$, en commençant par l'équation (2.10) et en utilisant l'équation (2.12), ils ont abouti à

$$(\lambda_n - I(t)) \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{n,k}(t)\rangle = \frac{\partial I(t)}{\partial t} |\varphi_{n,k}(t)\rangle \quad (2.13)$$

En prenant le produit scalaire avec $\langle \varphi_{i,k}(t) |$ et en utilisant l'équation (2.11) pour éliminer $\langle \varphi_{i,k}(t) | \frac{\partial I(t)}{\partial t} | \varphi_{n,k}(t) \rangle$ ils ont obtenu :

$$i\hbar(\lambda_n - \lambda_i) \langle \varphi_{i,k}(t) | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{n,k}(t) \rangle = (\lambda_n - \lambda_i) \langle \varphi_{i,k}(t) | H(t) | \varphi_{n,k}(t) \rangle \quad (2.14)$$

Pour $\lambda_n \neq \lambda_i$ on trouve

$$i\hbar \langle \varphi_{i,k}(t) | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{n,k}(t) \rangle = \langle \varphi_{i,k}(t) | H(t) | \varphi_{n,k}(t) \rangle \quad (2.15)$$

L'équation (2.15) n'implique pas

$$i\hbar \langle \varphi_{n,k}(t) | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{n,k}(t) \rangle = \langle \varphi_{n,k}(t) | H(t) | \varphi_{n,k}(t) \rangle \quad (2.16)$$

Si l'équation (2.14) est valable pour $\lambda_n = \lambda_i$ aussi bien que pour $\lambda_n \neq \lambda_i$ alors on déduit immédiatement que $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$ est une solution particulière de l'équation de Schrödinger.

Jusqu'ici, on n'a pas parlé de la phase de $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$: on peut définir un nouvel ensemble des vecteurs propres de $I(t)$ lié à l'ensemble précédent par un facteur de phase dépendant du temps :

$$|\varphi_{n,k}(t)\rangle_\alpha = \exp[i\alpha_{n,k}(t)] |\varphi_{n,k}(t)\rangle \quad (2.17)$$

où $\alpha_{n,k}$ est une fonction réelle du temps arbitrairement choisie. Ces $|\varphi_{n,k}(t)\rangle_\alpha$ sont des états propres orthonormaux de $I(t)$ associé à λ_n aussi bien que les $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$. Pour un choix approprié des phases $\alpha_{n,k}(t)$, l'équation (2.14) sera vérifiée pour $\lambda_n = \lambda_i$ et donc l'objectif sera atteint, à condition d'avoir :

$$\hbar \delta_{k,k} \frac{d\alpha_{n,k}}{dt} = \langle \varphi_{n,k}(t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi_{n,k}(t) \rangle \quad (2.18)$$

Pour satisfaire cette équation, les états $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$ doivent être choisis de sorte que le membre à droite s'annule pour $k \neq k$. La diagonalisation est toujours possible car l'opérateur $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t)$ est hermitien. Une fois on choisi les états, les phases $\alpha_{n,k}(t)$ sont choisies pour qu'elles satisfassent l'équation simple :

$$\hbar \frac{d\alpha_{n,k}}{dt} = \langle \varphi_{n,k}(t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi_{n,k}(t) \rangle \quad (2.19)$$

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

2.3 Solution générale

Du fait que chacun de ces nouveaux états propres de $I(t)$ satisfait l'équation de Schrödinger, la solution générale est donnée par :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,k} C_{n,k} e^{i\alpha_{n,k}(t)} |\varphi_{n,k}(t)\rangle \quad (2.20)$$

où $C_{n,k}$ sont des coefficients indépendants du temps correspondant à $|\psi(t_0)\rangle$:

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{n,k} C_{n,k} e^{i\alpha_{n,k}(t_0)} |\varphi_{n,k}(t_0)\rangle \quad (2.21)$$

Le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ représente la solution générale de l'équation de Schrödinger et les vecteurs d'état $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$ sont les états propres de l'invariant.

Dans certains cas, pour résoudre l'équation d'invariant dépendante du temps on utilise une transformation unitaire pour obtenir un invariant plus simple comme suit:

$$\phi_\lambda(\vec{r}) = U(t)\varphi_\lambda(\vec{r}, t) \quad (2.22)$$

avec :

$$I_0\phi_\lambda(\vec{r}) = \lambda\phi_\lambda(\vec{r}) \quad (2.23)$$

où :

$$I_0 = UIU^{-1} \quad (2.24)$$

Donc l'équation différentielle obtenue par la transformation est une équation différentielle plus simple qu'on peut résoudre par les méthodes bien connues.

Mais la question qui se pose maintenant c'est comment trouver un invariant pour un système quantique donné ?

Pour certains systèmes on construit l'opérateur invariant \hat{I} à partir des opérateurs de position \hat{x} et d'impulsion \hat{p} et ses multiplications selon la forme de l'hamiltonien H de tel sorte que l'opérateur invariant soit hermitien et vérifiait l'équation de Louville-Von Neumann (2-2).

Pour les autres cas d'un système de dimension finie, il y a un résultat dû à [14] qui stipule qu'on peut avoir un invariant pour le système (2-1) si est seulement si, on peut construire une algèbre de Lie. Dans le cas de dimension infinie, pour qu'un système de la forme (2-1) ait un invariant, il faut que l'algèbre de Lie soit de dimension infinie.

Paradoxalement, plusieurs exemples d'intérêt physique (comme, l'oscillateur harmonique), ont une algèbre de Lie de dimension finie (elle est même de dimension réduite).

Donc on se met là, dans le cas d'un système de dimension infinie, sous l'hypothèse d'avoir une algèbre de Lie de dimension finie. On va voir comment cette hypothèse peut nous aider à trouver l'ensemble des invariants de notre système de Schrödinger.

Supposons par exemple que l'algèbre de Lie engendrée par $H(t)$ est donnée par l'ensemble des opérateurs hermitiens:

$$A = \{T_1, T_2, \dots, T_n\} \quad (2.25)$$

On essaiera donc de trouver des invariants I qui se décomposent complètement sur cette algèbre de Lie. On prend alors I sous la forme :

$$I(t) = \sum_{i=1}^n B_i(t) T_i \quad (2-26)$$

En injectant cette forme dans la formule (2-2) ; on voit bien que les paramètres $B_i(t)$ dépendants du temps doivent vérifier un système d'équations différentielles.

Pour retrouver ces équations différentielles, nous avons besoin de connaître la décomposition des commutateurs $[H, T_i]$ dans la base Λ . En faisant cela, on trouvera les coefficients C_i^j :

$$[H, T_i] = \sum_{j=1}^n C_i^j T_j \quad (2-27)$$

Connaissant ces coefficients, on peut donner les équations différentielles, que les $B_i(t)$ doivent vérifier :

$$i\hbar \sum_{i=1}^n \dot{B}_i T_i = \sum_{j=1}^n C_i^j T_j, \quad i \in \{1, 2, \dots, n\} \quad (2-28)$$

Aussi, à chaque opérateur T_i qui vérifie l'équation (2-28), est associée une équation différentielle pour l'ensemble des paramètres $B_i(t)$.

Plusieurs auteurs ont étudiés les systèmes quantiques dépendants du temps en résolvant l'équation de Schrödinger par la théorie d'invariant pour différents systèmes, parmi lesquels: l'oscillateur harmonique généralisé et l'oscillateur singulier [15-32], la particule libre dans un potentiel linéaire [33-36], le système à deux niveaux [37], la particule chargée dans un champ magnétique [2,38], l'oscillateur singulier plus le terme $(1/x)p + p(1/x)$ [39] et les oscillateurs couplés en présence d'un champ magnétique dépendant du temps [40].

Chapitre 03

Solution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

3.1 Introduction

La dynamique quantique d'un système physique régit par un potentiel non-central est un sujet intéressant à la fois en physique et en chimie quantique. En particulier, nous pouvons trouver de nombreuses techniques pour dériver les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire d'un tel système décrit par ce genre de potentiel [41,42]. Plusieurs recherches théoriques en physique ont été réalisées dans ce domaine. Certaines d'entre eux sont des recherches reliées aux états liés d'un électron dans un potentiel de Coulomb en présence du champ d'Aharonov-Bohm [43,44], la quantification des potentiels moléculaires en forme d'anneau en chimie quantique[45], et l'interaction entre les noyau déformées [46,47]. L'étude des systèmes caractérisés par des potentiels non centraux moléculaires est nécessaire pour obtenir des meilleurs résultats dans l'analyse quantique des structures et des interactions entre les molécules.

Le contenu de ce chapitre est concentré sur les solutions quantiques d'un système de potentiel non central dépendant du temps, ou le potentiel non central est composé de potentiel singulier plus le terme $\frac{1}{r}p_r + p_r\frac{1}{r}$. Puisque le potentiel que nous allons traiter ici est très compliqué, le traitement habituelle classique basé sur la méthode de séparation des variables devient un outil insuffisant pour résoudre ce problème. Pour cette raison il faut utiliser d'autres méthodes possibles pour trouver les solutions quantiques du système étudié. A cet effet, nous allons utiliser la méthode de l'opérateur invariant, la méthode de transformation unitaire, la méthode de Nikiforov-Uvarov [48] et la méthode d'itération asymptotique pour résoudre ce problème.

Les solutions de l'équation de Schrödinger pour ce système physique sont représentées en termes des états propres d'un opérateur invariant. Parfois, l'équation aux valeurs propres de l'opérateur invariant devenue une tâche difficile à résoudre pour un hamiltonien dépendant du temps, pour cette raison, nous avons utilisé la transformation unitaire pour simplifier le problème. Et par conséquent, nous pouvons facilement résoudre l'équation aux valeurs propres dans le système transformé en appliquant des techniques mathématiques spéciales telles que la méthode de Nikiforov-Uvarov et la méthode d'itération asymptotique. Les états propres du système transformé peuvent être obtenus à partir de la solution complète de

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

l'équation aux valeurs propres de l'opérateur invariant. A travers la transformation unitaire inverse, nous obtenons les états propres dans le système hamiltonien original.

3.2 Opérateur Hamiltonien et construction de l'invariant

Il est important de souligner que le problème d'une particule qui se meut dans un potentiel non central est décrit par un Hamiltonien dépendant du temps sous la forme :

$$H(t) = A(t) \left(p^2 + \frac{f(\theta, \varphi)}{r^2} \right) + B(t)(rp_r + p_r r) + D(t)r^2 + \frac{E(t)}{r^2} + C(t) \left(\frac{1}{r} p_r + p_r \frac{1}{r} \right) \quad (3.1)$$

où $A(t) - C(t)$ et sont des coefficients dépendants du temps avec $g(\theta, \varphi)$ est une fonction dépendante de θ et φ , le terme $C(t) \left(\frac{1}{r} p_r + p_r \frac{1}{r} \right)$ donne le terme $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}$ qui apparait dans la partie radiale de l'équation de Schrödinger décrivant l'évolution des systèmes quantiques de N corps [49].

L'opérateur du moment conjugué dans les coordonnées sphériques est $p^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}$ avec $p_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$ et le moment angulaire total $L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]$.

L'équation de Schrödinger pour ce système hamiltonien est écrite comme suit :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n(t) = H(t) \psi_n(t) \quad (3.2)$$

En général, les propriétés quantiques d'un système Hamiltonien dépendant du temps sont étudiées en introduisant un opérateur invariant associé au système. Un invariant $I(t)$ est construit à partir de l'équation de Liouville -Van Neumann :

$$\frac{dI(t)}{dt} = \frac{\partial I(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I(t), H(t)] = 0 \quad (3.3)$$

Pour obtenir un invariant associé au système quantique décrit par l'hamiltonien (3.1), on utilise la transformation unitaire dépendant du temps.

$$\psi(\vec{r}, t) = U(t) \tilde{\psi}(\vec{r}, t) \quad (3.4)$$

tel que :

$$U(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{2C(t)B(t)}{A(t)} dt} \quad (3.5)$$

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

Sous cette transformation unitaire l'équation de Schrödinger (3.2) devient

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(\vec{r}, t) = \tilde{H} \tilde{\psi}(\vec{r}, t) \quad (3.6)$$

où le nouveau hamiltonien :

$$\tilde{H}(r, p, t) = U(t)^{-1} H(r, p, t) U(t) - i\hbar U(t)^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U(t) \quad (3.7)$$

s'écrit sous la forme :

$$\tilde{H}(r, p, t) = H(r, p, t) + \frac{2C(t)B(t)}{A(t)} \quad (3.8)$$

Les conditions : $E(t)/A(t) = \text{const}$ et $C(t)/A(t) = \text{const}$, nous permettrons d'écrire l'Hamiltonien $\tilde{H}(r, p, t)$ sous forme d'une combinaison des générateurs du groupe algébrique de Lie $SU(1,1)$:

$$\tilde{H} = A(t)T_1 + B(t)T_2 + D(t)T_3 \quad (3.9)$$

avec :

$$\begin{aligned} T_1 &= \left(p^2 + \frac{f(\theta, \varphi)}{r^2} \right) + \frac{E}{A} \frac{1}{r^2} + \frac{C}{A} \left(\frac{1}{r} p_r + p_r \frac{1}{r} \right) \\ T_2 &= r p_r + p_r r + \frac{2C(t)}{A(t)} \\ T_3 &= r^2 \end{aligned} \quad (3.10)$$

où :

$$\begin{aligned} [T_1, T_2] &= -4i\hbar T_1 \\ [T_2, T_3] &= -4i\hbar T_3 \\ [T_3, T_1] &= 2i\hbar T_2 \end{aligned} \quad (3.11)$$

On note que l'algèbre formée par les générateurs $\{T_1, T_2, T_3\}$ est identique à celle d'un oscillateur. Alors, nous cherchons l'invariant sous la forme :

$$I(t) = \mu_1(t)T_1 + \mu_2(t)T_2 + \mu_3(t)T_3 \quad (3.12)$$

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

En utilisant l'équation (3.3), obtenons les relations qui relient les coefficients $\mu_r(t)$ de l'expression (3.12) sous la forme :

$$\begin{aligned}\dot{\mu}_1(t) &= 4(B\mu_1(t) - A\mu_2(t)) \\ \dot{\mu}_2(t) &= 2(D\mu_1(t) - A\mu_3(t)) \\ \dot{\mu}_3(t) &= 4(D\mu_2(t) - B\mu_3(t))\end{aligned}\tag{3.13}$$

Le choix $\mu_1 = \rho^2(t)$ conduit à l'équation non linéaire de Pinney [50] satisfaite par $\rho(t)$:

$$\ddot{\rho}(t) - \frac{\dot{A}}{A}\dot{\rho}(t) + 2\left(2AD - \frac{AB}{A} - 2B^2 - \dot{B}\right)\rho(t) = 4EA\frac{1}{\rho^3(t)}\tag{3.14}$$

et par conséquent :

$$\begin{aligned}\mu_2(t) &= \frac{1}{2A}(2B\rho^2(t) - \dot{\rho}(t)\rho(t)) \\ \mu_3(t) &= \frac{1}{4A^2}(2B\rho(t) - \dot{\rho}(t))^2 + \frac{E}{A}\frac{1}{\rho^2(t)}\end{aligned}\tag{3.15}$$

Finalement l'invariant s'écrit :

$$\begin{aligned}I(t) &= \rho^2(t)\left(p^2 + \frac{f(\theta, \varphi)}{r^2} + \frac{E}{A}\frac{1}{r^2} + \frac{C}{A}\left(\frac{1}{r}p_r + p_r\frac{1}{r}\right)\right) \\ &+ \left(\frac{1}{4A^2}(2B\rho(t) - \dot{\rho}(t))^2 + \frac{E}{A}\frac{1}{\rho^2(t)}\right)r^2 \\ &+ \frac{1}{2A}(2B\rho^2(t) - \dot{\rho}(t)\rho(t))\left(rp_r + p_r + \frac{2c}{a}\right)\end{aligned}\tag{3.16}$$

Pour résoudre l'équation de Schrödinger (3.2) il faut trouver les états et les valeurs propres de l'invariant $I(t)$:

$$I\phi_n(\vec{r}, t) = E_n\phi_n(\vec{r}, t)\tag{3.17}$$

où E_n sont des valeurs propres constantes de $I(t)$ et les états $\phi_n(\vec{r}, t)$ sont les vecteurs propres correspondants. Et en suite on détermine la phase $\alpha_n(t)$ vérifiant l'équation suivante :

$$\hbar\frac{d}{dt}\alpha_n(t) = \langle\phi_n(\vec{r}, t)|\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \tilde{H}\right)|\phi_n(\vec{r}, t)\rangle\tag{3.18}$$

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

Pour trouver la solution de l'équation (3.17), il faut effectuer la transformation unitaire dépendante du temps suivante :

$$\phi'_n(\vec{r}) = U(t)\phi_n(\vec{r}, t) \quad (3.19)$$

L'opérateur unitaire dépendant du temps $U(t)$ est donné par l'expression :

$$U(t) = \exp\left(\frac{i\ln \rho(t)}{2\hbar}(rp_r + p_r r)\right) \times \exp\left(\frac{i\mu_2}{2\hbar\mu_1} r^2\right) \quad (3.20)$$

Dans ce cas l'invariant $I(t)$ se transforme en un nouveau invariant indépendant du temps $I_0 = UIU^{-1}$ et les équations aux valeurs propres (3.17) se transforment en :

$$I_0 \phi'_n(r, \theta, \varphi) = \left(p^2 + \frac{f(\theta, \varphi)}{r^2} + \frac{E}{A} \frac{1}{r^2} + \frac{E}{A} r^2 + \frac{C}{A} \left(\frac{1}{r} p_r + p_r \frac{1}{r}\right)\right) \phi'_n(r, \theta, \varphi) = E_n \phi'_n(r, \theta, \varphi) \quad (3.21)$$

ou nous avons utilisé les deux relations connus :

$$UrU^{-1} = \rho r \quad (3.22)$$

$$UpU^{-1} = \frac{p}{\rho} - \frac{\mu_2}{\mu_1} \rho r \quad (3.23)$$

Dans ce cas, l'équation aux valeurs propres dans le système transformé est réécrite sous la forme :

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right] \phi'_{nml}(r, \theta, \varphi) + \left(\frac{f(\theta, \varphi)}{r^2} - \frac{E}{A} \frac{1}{r^2} - \frac{E}{A} r^2 - \frac{C}{A} \left(\frac{1}{r} p_r + p_r \frac{1}{r} \right) \right) \phi'_{nml}(r, \theta, \varphi) = E_{nlm} \phi'_{nml}(r, \theta, \varphi) \quad (3.24)$$

où $\phi'_{nml}(r, \theta, \varphi)$ étant les fonctions d'onde totales, mais sans facteurs de phase. Dans ce cas cette équation ne dépend pas du temps, donc la méthode de séparation des variables pour résoudre cette équation est applicable. Par conséquent, on pose :

$$\phi'_{nml}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) f_{nlm}(\theta, \varphi) \quad (3.25)$$

Substitutions l'équation (3.25) dans l'équation (3.24) nous obtenons deux équations différentielles séparées, l'une représente l'équation radiale :

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{1}{\hbar^2} \left(E_n - V(r) - \frac{\hbar^2 c}{r^2} \right) R_{nl}(r) = 0 \quad (3.26)$$

et l'autre représente la partie angulaire :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + c - \frac{f(\theta, \varphi)}{\hbar^2} \right) f_{nlm}(\theta, \varphi) = 0 \quad (3.27)$$

avec c est une constante de séparation.

3.3 Solution de la partie radiale de l'équation de Schrödinger

L'équation radiale se réduit à une équation différentielle du deuxième ordre indépendante du temps :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + a \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - c' r^2 - d \frac{1}{r^2} + \frac{E_n}{\hbar^2} \right) \phi'_n(r, \theta, \varphi) = 0 \quad (3.28)$$

tel que $a = 2 \left(1 + \frac{iC}{\hbar A} \right)$, $c' = \frac{E}{\hbar^2 A}$, $d = l(l+1) - \frac{2iC}{\hbar A}$.

Cette dernière équation est équivalente à l'équation radiale d'un oscillateur harmonique à deux dimensions en présence de l'effet Aharonov-Bohm [43,51]. Pour chercher les solutions de l'équation différentielle (3.28), nous effectuons le changement de variable suivant :

$$y = r^2 \quad (3.29)$$

Nous obtenons l'équation différentielle suivante :

$$\frac{d^2 R}{dy^2} + \frac{1+a}{2} \frac{1}{y} \frac{dR}{dy} + \frac{1}{y^2} \left(-\frac{c'}{4} y^2 + \frac{E_n}{\hbar^2} y - \frac{d}{4} \right) R = 0 \quad (3.30)$$

Pour résoudre cette équation on utilise la méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U) [48].

3.3.1 La méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U)

La méthode (N-U) [48] 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 :

$$\psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} \psi(s) = 0 \quad (3.31)$$

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

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

$$\psi(s) = \emptyset(s)y(s) \quad (3.32)$$

L'équation (3.31) devienne :

$$\sigma(s)y''(s) + \tau(s)y'(s) + \nu y(s) = 0 \quad (3.33)$$

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

$$\frac{\emptyset(s)'}{\emptyset(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \quad (3.34)$$

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

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s)\rho(s)] \quad (3.35)$$

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

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho \quad (3.36)$$

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

$$\pi(s) = \frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma} - k\sigma} \quad (3.37)$$

$$\nu = k + \pi' \quad (3.38)$$

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 :

$$\nu = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma'' \quad (3.39)$$

où

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) \quad (3.40)$$

et son dérivé est négatif.

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

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1 - \alpha_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{s^2(1 - \alpha_3 s)^2} \right] \psi = 0 \quad (3.41)$$

Nous pouvons résoudre ceci comme suit. Lorsque l'équation. (3.41) est comparée avec l'équation (3.31), nous obtenons

$$\tilde{\tau} = \alpha_1 - \alpha_2 s \quad (3.42)$$

et

$$\sigma = s(1 - \alpha_3 s) \quad (3.43)$$

et aussi

$$\tilde{\sigma} = -\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3 \quad (3.44)$$

En substituent ceux-ci dans l'équation (3.37)

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5 s \pm \sqrt{(\alpha_6 - k\alpha_3)s^2 + (\alpha_7 + k)s + \alpha_8} \quad (3.45)$$

où

$$\alpha_4 = \frac{1}{2}(1 - \alpha_1), \quad (3.46)$$

$$\alpha_5 = \frac{1}{2}(\alpha_2 - 2\alpha_3), \quad (3.47)$$

$$\alpha_6 = \alpha_5^2 + \xi_1, \quad (3.48)$$

$$\alpha_7 = 2\alpha_4\alpha_5 - \xi_2, \quad (3.49)$$

$$\alpha_7 = 2\alpha_4\alpha_5 - \xi_2, \quad (3.50)$$

$$\alpha_8 = \alpha_4^2 + \xi_3, \quad (3.51)$$

Dans l'équation (3.45), la fonction sous la racine carrée doit être le carré d'un polynôme conformément à la méthode de (NU), de telle sorte que

$$k_{1,2} = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) \mp 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \quad (3.52)$$

ou, nous définissons

$$\alpha_9 = \alpha_3\alpha_7 + \alpha_3^2\alpha_8 + \alpha_6 \quad (3.53)$$

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

Pour chaque K les fonctions π sont obtenues. Pour

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) - 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \quad (3.54)$$

π devienne

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5 s - \left[\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) s - \sqrt{\alpha_8} \right] \quad (3.55)$$

Pour le même K , pour l'équation (3.40), (3.42) et (3.45)

$$\tau = \alpha_1 + 2\alpha_4 - (\alpha_2 - 2\alpha_5)s - 2\left[\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) s - \sqrt{\alpha_8} \right] \quad (3.56)$$

et

$$\tau' = -(\alpha_2 - 2\alpha_5) - 2\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) = -2\alpha_3 - 2\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) < 0 \quad (3.57)$$

sont obtenues. Quand l'équation (3.38) est utilisée avec l'équation (3.39) et l'équation (3.56) l'équation suivante est dérivée:

$$\alpha_2 n - (2n + 1)\alpha_5 + (2n + 1)\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) + n(n - 1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} = 0 \quad (3.58)$$

Cette équation donne le spectre de l'énergie pour le problème donné. Pour l'équation (3.36) :

$$\rho(s) = s^{\alpha_{10}-1} (1 - \alpha_3 s)^{\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1} \quad (3.59)$$

est trouvé et lorsque cette équation est utilisée dans l'équation (3.35)

$$y_n = P_n^{(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1)} (1 - 2\alpha_3 s) \quad (3.60)$$

est obtenue, où,

$$\alpha_{10} = \alpha_1 + 2\alpha_4 + 2\sqrt{\alpha_8} \quad (3.61)$$

et

$$\alpha_{11} = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) \quad (3.62)$$

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

et $P_n^{(\alpha,\beta)}$ sont les polynômes de Jacobi. Utilisant l'équation (3.34),

$$\phi(s) = s^{\alpha_{12}}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} \quad (3.63)$$

est obtenue et la solution générale devienne :

$$\psi = \phi(s)y(s) \quad (3.64)$$

$$\psi = s^{\alpha_{12}}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} P_n^{(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1)}(1 - 2\alpha_3 s) \quad (3.65)$$

Ici, les fonctions alpha sont données par :

$$\alpha_{12} = \alpha_4 + \sqrt{\alpha_8} \quad (3.66)$$

et

$$\alpha_{13} = \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \quad (3.67)$$

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

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} P_n^{(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1)}(1 - 2\alpha_3 s) = L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11} s) \quad (3.68)$$

et

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} = e^{\alpha_{13} s} \quad (3.69)$$

La solution donnée dans l'équation (3.65) devienne :

$$\psi = s^{\alpha_{12}} e^{\alpha_{13} s} L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11} s) \quad (3.70)$$

Dans certains cas, on est besoin d'une deuxième solution de l'équation (3.45). Dans ce cas, si la même procédure est suivie on utilisant

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8) + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} \quad (3.71)$$

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

Cette solution devienne

$$\psi = s^{\alpha_{12}^*} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12}^* - \frac{\alpha_{13}^*}{\alpha_3}} P_n \left(\alpha_{10}^* - 1, \frac{\alpha_{11}^*}{\alpha_3} - \alpha_{10}^* - 1 \right) (1 - 2\alpha_3 s) \quad (3.72)$$

est le spectre d'énergie est

$$\alpha_2 n - 2n\alpha_5 + (2n + 1)(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) + n(n - 1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} + \alpha_5 = 0 \quad (3.73)$$

Les paramètres prédéfinis alpha sont les suivants :

$$\alpha_{10}^* = \alpha_1 + 2\alpha_4 - 2\sqrt{\alpha_8} \quad (3.74)$$

$$\alpha_{11}^* = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \quad (3.75)$$

$$\alpha_{12}^* = \alpha_4 - \sqrt{\alpha_8} \quad (3.76)$$

$$\alpha_{13}^* = \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \quad (3.77)$$

L'équation (3.30) a la forme de l'équation (3.41), avec :

$$\alpha_1 = \frac{1-a}{2}, \alpha_2 = 0, \alpha_3 = 0, \xi_1 = \frac{c'}{4}, \xi_2 = \frac{E_n}{4\hbar^2}, \xi_3 = \frac{d}{4} \quad (3.78)$$

En employant les équations (3.46) - (3.51), on obtient :

$$\alpha_4 = \frac{1-a}{4}, \alpha_5 = 0, \alpha_6 = \frac{c'}{4}, \alpha_7 = -\frac{E_n}{4\hbar^2}, \alpha_8 = \frac{(1-a)^2}{16} + \frac{d}{4} \quad (3.79)$$

et les équations (3.53) , (3.61) , (3.62) , (3.66) et (3.67), donnent :

$$\alpha_9 = \frac{c'}{4}, \alpha_{10} = 1 + 2\sqrt{\frac{(1-a)^2}{16} + \frac{d}{4}}, \alpha_{11} = \sqrt{c'}, \alpha_{12} = \frac{1-a}{4} + \sqrt{\frac{(1-a)^2}{16} + \frac{d}{4}}, \alpha_{13} = -\frac{1}{2}\sqrt{c'} \quad (3.80)$$

Pour trouver les valeurs propres de l'invariant I_0 , on utilise l'équation (3.58), on obtient :

$$E_n = 2\hbar \sqrt{\frac{E}{A}} (2n + \alpha + 1) \quad (3.81)$$

avec :

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2iC}{\hbar A}\right)^2 + 2l(l+1) \quad (3.82)$$

On utilise l'équation (3.70), on trouve la solution de l'équation radiale (3.28) comme suit :

$$R(r) = A_n r^{-\frac{1}{2} - \frac{iC}{\hbar A} + \alpha} e^{-\frac{1}{2\hbar} \sqrt{\frac{E}{A}} r^2} L_n^\alpha \left(\frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{E}{A}} r^2 \right) \quad (3.83)$$

avec :

A_n : est la constante de normalisation qui sera déterminée plus tard et $L_n^\alpha(z)$, sont les polynômes de Laguerre.

Par le choix de : $\frac{C}{A} = i\hbar$ et l'utilisation de la propriété suivante des polynômes de Laguerre :

$$\int_0^\infty z^{\alpha+1} e^{-z} |L_n^\alpha(z)|^2 dz = (2n + \alpha + 1) \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{\Gamma(n+1)} \quad (3.84)$$

On trouve la constante de normalisation comme suit:

$$A_n = \sqrt{2 \left(\frac{E}{A}\right)^{\frac{\alpha}{2}+1} \frac{\Gamma(n+1)}{\hbar^{\alpha+2} (2n+\alpha+1) \Gamma(n+\alpha+1)}} \quad (3.85)$$

Par conséquent la fonction radiale devient :

$$R(r) = \sqrt{2 \left(\frac{E}{A}\right)^{\frac{\alpha}{2}+1} \frac{\Gamma(n)}{\hbar^{\alpha+2} (2n+\alpha+1) \Gamma(n+\alpha+1)}} r^{\alpha+\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2\hbar} \sqrt{\frac{E}{A}} r^2} L_n^\alpha \left(\frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{E}{A}} r^2 \right) \quad (3.86)$$

3.4 Solution de la partie angulaire de l'équation de Schrödinger

Dans cette section, nous considérons le potentiel non central donné par les deux références [52,53] :

$$f(\theta, \varphi) = \frac{a}{\sin^2 \theta} + \frac{b \cos \theta}{\sin^2 \theta} + \frac{V(\varphi)}{\sin^2 \theta}$$

$$V(\varphi) = d \operatorname{cosec}^2 v\varphi + e \operatorname{sec}^2 v\varphi, \quad v = 1, 2 \dots \quad (3.87)$$

où a et b sont des constantes positives réelles, d et e sont des paramètres réelles.

Nous décomposons la fonction $f_{nml}(\theta, \varphi)$ sous la forme :

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

$$f_{nml}(\theta, \varphi) = g_{nml}(\theta)h_{nml}(\varphi), \quad (3.88)$$

On obtient les deux équations différentielles séparées :

$$\frac{d^2 g(\theta)}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{dg(\theta)}{d\theta} + \left(c - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} - \frac{a}{\hbar^2 \sin^2 \theta} - b \frac{\cos \theta}{\hbar^2 \sin^2 \theta} \right) g(\theta) = 0 \quad (3.89)$$

$$\frac{d^2 h(\varphi)}{d\varphi^2} + \left(m^2 - \frac{V(\varphi)}{\hbar^2} \right) h(\varphi) = 0, \quad (3.90)$$

Pour évaluer les solutions de cette équation de la partie angulaire qui varie en fonction du paramètre θ et l'autre varie en fonction de φ , en introduisant un nouveau changement de variable $\cos \theta = z$, on peut maintenant réécrire l'équation (3.89) sous la forme :

$$\frac{d^2 g(z)}{dz^2} - \frac{2z}{1-z^2} \frac{dg(z)}{dz} + \frac{1}{(1-z^2)^2} \left(-cz^2 - \frac{b}{\hbar^2} z + c - m^2 - \frac{a}{\hbar^2} \right) g(z) = 0 \quad (3.91)$$

Pour évaluer les solutions de cette équation différentielle, on utilise la méthode (N-U) [48,54]. En comparant l'équation (3.31) avec cette équation, on en déduit les polynômes associés suivants :

$$\tilde{\tau}(z) = -2z, \quad \sigma(z) = 1 - z^2, \quad \tilde{\sigma}(z) = -cz^2 - \frac{b}{\hbar^2} z + c - m^2 - \frac{a}{\hbar^2} \quad (3.92)$$

Où $\tilde{\tau}(z)$, $\sigma(z)$, et $\tilde{\sigma}(z)$ sont des fonctions d'une variable z .

Compte tenu de la Réf [46], la fonction π figurée s'écrit sous la forme :

$$\pi(z) = \pm \left[(c - k)z^2 + \frac{b}{\hbar^2} z - \left(c + m^2 - \frac{a}{\hbar^2} - k \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.93)$$

Selon la méthode (N-U), nous pouvons écrire π comme :

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

$$\pi(z) = \pm \begin{cases} \left(\frac{m^2 + (a/\hbar^2)^2 + \mu}{2} \right)^{\frac{1}{2}} Z + \frac{b/\hbar^2}{2 \left(\frac{m^2 + (a/\hbar^2)^2 + \mu}{2} \right)^{\frac{1}{2}}}, \text{ pour } k = \frac{2c - m^2 - (a/\hbar^2) - \mu}{2} \\ \left(\frac{m^2 + (a/\hbar^2)^2 - \mu}{2} \right)^{\frac{1}{2}} Z + \frac{b/\hbar^2}{2 \left(\frac{m^2 + (a/\hbar^2)^2 - \mu}{2} \right)^{\frac{1}{2}}}, \text{ pour } k = \frac{2c - m^2 - (a/\hbar^2) + \mu}{2} \end{cases} \quad (3.94)$$

avec $\mu = [(m^2 + a/\hbar^2)^2 - (b/\hbar^2)^2]^{1/2}$. Pour le polynôme $\tau = \tilde{\tau} + 2\pi$, ou son dérivé est négative, on a :

$$\tau(z) = -2z \left[1 + \left(\frac{m^2 + (a/\hbar^2) + \mu}{2} \right)^{1/2} \right] - \frac{b/\hbar^2}{\left(\frac{m^2 + (a/\hbar^2) - \mu}{2} \right)^{1/2}} \quad (3.95)$$

Puis, nous obtenons λ et $\lambda_{n'}$:

$$\lambda = \frac{2c - (m^2 + a/\hbar^2)}{2} - \frac{\mu}{2} - \left(\frac{m^2 + a/\hbar^2 + \mu}{2} \right)^{1/2} \quad (3.96)$$

$$\lambda_{n'} = 2n' \left[1 + \left(\frac{m^2 + a/\hbar^2 + \mu}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] + n'(n' - 1) \quad (3.97)$$

En utilisant la définition de $c = l(l + 1)$ et en comparant l'équation (3.96) et l'équation (3.97), obtient la valeur de l sous la forme :

$$l = n' + \left(\frac{m^2 + a/\hbar^2 + \left(m^2 + a/\hbar^2 - (b/\hbar^2)^2 \right)^{\frac{1}{2}}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.98)$$

Nous obtenons les valeurs propres de l'opérateur invariant I_0 comme suit :

$$E_{n n' m} = 4\hbar \sqrt{\frac{E}{A}} \left[n + \left(n' + \left(\frac{m^2 + a/\hbar^2 + \left(m^2 + a/\hbar^2 - (b/\hbar^2)^2 \right)^{\frac{1}{2}}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \right) + \frac{5}{2} \right] \quad (3.99)$$

On peut également obtenir la fonction d'onde de la partie angulaire de l'équation de Schrödinger (3.89), en utilisant $\sigma(z)$ et $\pi(z)$ sur la base de la méthode (N-U). Pour cela, les fonctions nécessaires au développement de la théorie (N-U) correspondant sont :

$$W(z) = (1 - z)^{(m_1 + m_2)/2} (1 + z)^{(m_1 - m_2)/2} \quad (3.100)$$

$$\rho(z) = (1 + z^2)^{m_1} \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{-m_2} \quad (3.101)$$

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

$$f_{n'}(z) = f_{0,n'}(1-z)^{-(m_1+m_2)}(1+z)^{-(m_1-m_2)} \times \frac{dn'}{dz^{n'}} [(1-z)^{n'+(m_1+m_2)}(1+z)^{n'+(m_1-m_2)}] \quad (3.102)$$

où $m_1 = [(m^2 + a/\hbar^2 + \mu)/2]^{\frac{1}{2}}$, $m_2 = [(m^2 + a/\hbar^2 - \mu)/2]^{\frac{1}{2}}$. La solution $f_{n'}(z)$ est exprimée en termes de polynômes de Jacobi $p_{n'}^{(m_1+m_2, m_1-m_2)}(z)$. En substituant les équations (3.100), (3.101) et (3.102) dans l'équation (3.32), les fonctions d'onde correspondantes sont :

$$g_{n'}(\theta) = g_{0,n'}(1 - \cos \theta)^{\frac{(m_1+m_2)}{2}} (1 + \cos \theta)^{\frac{(m_1-m_2)}{2}} p_{n'}^{(m_1+m_2, m_1-m_2)}(\cos \theta) \quad (3.103)$$

Tel que $g_{0,n'}$ est la constante de normalisation déterminée par $\int_{-1}^1 g_{n'}(z)g_{n'}^*(z)dz = 1$. En utilisant la relation d'orthogonalité des polynômes de Jacobi, la constante de normalisation devient :

$$g_{0,n'} = \left(\frac{(2n'+2m_1+1)\Gamma(n'+1)\Gamma(n'+2m_1+1)}{2^{2m_1+1}\Gamma(n'+m_1+m_2+1)\Gamma(n'+m_1-m_2+1)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.104)$$

Pour compléter la solution de la partie angulaire de l'équation de Schrödinger, nous résolvons l'équation (3.90) qui varie en fonction de φ .

$$\frac{d^2h(\varphi)}{d\varphi^2} + \left(m^2 - \frac{dcos^2v\varphi + esec^2v\varphi}{\hbar^2} \right) h(\varphi) = 0, \quad v = 1, 2, \dots \quad (3.105)$$

La définition d'une nouvelle variable $z = \cos(v\varphi)$, nous permet d'écrire l'équation différentielle (3.105) sous la forme :

$$\frac{d^2h(\varphi)}{dz^2} + \frac{z}{1-z^2} \frac{dh(\varphi)}{dz} + \left(\frac{-E^2z^4 + \Omega z^2 - \Lambda}{(z(1-z^2))^2} \right) h(\varphi) = 0 \quad (3.106)$$

tel que :

$$E^2 = \frac{m^2}{v^2}, \Omega = \frac{m^2}{v^2} - \frac{d}{\hbar^2 v^2} + \frac{e}{\hbar^2 v^2}, \Lambda = \frac{e}{\hbar^2 v^2} \quad (3.107)$$

Il existe de nombreuses techniques disponibles dans la littérature qui peuvent être utilisées pour résoudre cette équation différentielle avec des conditions aux limites. Dans notre cas, nous introduisons une nouvelle technique qui s'appelle la méthode d'itération

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

asymptotique (AIM) [55,56]. L'avantage de cette méthode réside dans sa capacité à améliorer la précision du calcul numérique des observables physiques, en particulier le spectre d'énergie.

3.4.1 Les concepts de base de la méthode d'itération asymptotique

Dans cette section, nous présentons des notions de base sur la méthode d'itération asymptotique (AIM). Cette méthode a été proposée pour résoudre l'équation différentielle linéaire et homogène de second ordre suivante :

$$\frac{d^2 f_n(x)}{dx^2} = \lambda_0(x) \frac{df_n(x)}{dx} + S_0(x) f_n(x), \quad \lambda_0(x) \neq 0 \quad (3.108)$$

Essentiellement, les fonctions $S_0(x)$ et $\lambda_0(x)$ sont suffisamment différentiables. L'équation (3.108) peut être itérée jusqu'à $(k+1)$ ème et le $(k+2)$ ème dérivés, $k = 1, 2, 3, \dots$ par conséquent, nous avons

$$\frac{d^{k+1} f_n(x)}{dx^{k+1}} = \lambda_{k-1}(x) \frac{df_n(x)}{dx} + S_{k-1}(x) f_n(x) \quad (3.109)$$

$$\frac{d^{k+2} f_n(x)}{dx^{k+2}} = \lambda_k(x) \frac{df_n(x)}{dx} + S_k(x) f_n(x) \quad (3.110)$$

où $\lambda_n(x)$ et $S_k(x)$ sont exprimées par les relations de récurrence suivantes :

$$\lambda_k(x) = \frac{df_{k-1}(x)}{dx} + S_{k-1}(x) + \lambda_0(x) \lambda_{k-1}(x), \quad (3.111)$$

$$S_k(x) = \frac{dS_{k-1}}{dx} + S_0(x) \lambda_{k-1}(x) \quad (3.112)$$

A partir du rapport de la $(k+2)$ ème et $(k+1)$ ème dérivés, nous avons

$$\frac{d}{dx} \ln \left[\frac{d^{k+1} f_n(x)}{dx^{k+1}} \right] = \frac{\frac{d^{k+2} f_n(x)}{dx^{k+2}}}{\frac{d^{k+1} f_n(x)}{dx^{k+1}}} = \frac{\lambda_k(x) \left[\frac{df_n(x)}{dx} + \frac{S_k(x)}{\lambda_k(x)} f_n(x) \right]}{\lambda_{k-1}(x) \left[\frac{df_n(x)}{dx} + \frac{S_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)} f_n(x) \right]} \quad (3.113)$$

Maintenant, nous introduisons l'aspect asymptotique de la méthode. Si nous avons, pour k grand $k > 0$, on obtient $\varpi(x)$ sous forme

$$\frac{S_k(x)}{\lambda_k(x)} = \frac{S_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)} = \varpi(x) \quad (3.114)$$

avec la condition :

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

$$\Delta_k(x) = \begin{bmatrix} \lambda_k(x) & S_k(x) \\ \lambda_{k-1}(x) & S_{k-1}(x) \end{bmatrix} = 0, \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (3.115)$$

Ensuite, la solution de l'équation (3.108) peut être écrite comme :

$$f_n(x) = \exp\left(-\int_0^x \varpi(x) dz\right) \left[h_1 + h_2 \int_0^x \exp\left(\int_0^z [\lambda_0(x) + 2\varpi(x)] dt\right) dz \right] \quad (3.116)$$

où h_1 et h_2 sont deux constantes.

Pour un potentiel donné, la procédure consiste d'abord de convertir l'équation de Schrödinger dans la forme de l'équation (3.108). Ensuite, les fonctions $S_0(x)$ et $\lambda_0(x)$ sont déterminées, tandis que $S_n(x)$ et $\lambda_n(x)$ sont calculées par les relations de récurrence (3.111) et (3.112).

Si le problème est exactement résoluble, les valeurs propres de l'énergie sont obtenues en imposant la condition représentée par l'équation (3.115). Dans le cas contraire, pour un nombre quantique principal spécifique n , nous choisissons un point x_0 approprié, généralement déterminé comme la valeur maximale de la fonction d'onde asymptotique ou bien la valeur minimal du potentiel et par conséquent les valeurs propres de l'énergie approximatives sont déterminées à partir des racines de la condition (3.115).

La solution générale de l'équation (3.108) est donnée par l'équation (3.116). La première partie de l'équation (3.116) donne les solutions polynomiales qui sont convergentes et physiques, tandis que la seconde partie de l'équation (3.116) donne des solutions divergentes.

Bien que l'équation (3.119) soit la solution générale de l'équation (3.108), nous prenons le coefficient de la seconde partie $h_2 = 0$, afin de trouver les solutions intégrables. Par conséquent, les fonctions propres correspondantes peuvent être obtenues à partir du générateur de la fonction d'onde suivante pour les potentiels exactement résolubles :

$$f_n(x) = h_1 \exp\left(-\int_0^x \frac{S_k(t)}{\lambda_k(t)} dt\right), \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (3.117)$$

où n représente le nombre quantique principal.

On choisit :

$$h(z) = z^\zeta (1 - z^2)^\delta \chi(z) \quad (3.118)$$

avec :

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

$$\delta = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left(1 + 4 \frac{e}{\hbar^2 v^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.119)$$

$$\zeta = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \left(1 + 4 \frac{d}{\hbar^2 v^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.120)$$

Lorsque l'on insère l'équation. (3.118) dans l'équation (3.106), nous obtenons :

$$\frac{d^2 \chi(z)}{dz^2} = \lambda_0(z) \frac{d\chi(z)}{dz} + S_0(z) \chi(z) \quad (3.121)$$

avec :

$$\lambda_0(z) = \frac{(2\zeta + 4\delta + 1)z^2 - 2\zeta}{z(1-z^2)}, \quad S_0(z) = \frac{(2\delta + \zeta)^2 - E^2}{(1-z^2)} \quad (3.122)$$

Maintenant, nous calculons, $\Delta_1(z), \Delta_2(z), \Delta_3(z), \dots, \Delta_{n''}(z)$, la condition de quantification donne : $\epsilon_0, \epsilon_1, \dots, \epsilon_{n''}$. En utilisant le même mode opératoire que dans le cas précédent et après quelques itérations, nous obtenons :

$$\frac{S_0(z)}{\lambda_0(z)} = \frac{S_1(z)}{\lambda_1(z)} \Rightarrow \Delta_1(z) = \lambda_1(z)S_0(z) - S_1(z)\lambda_0(z) = 0 \Rightarrow E_0 = \pm(2\delta + \zeta) \quad (3.123)$$

$$\frac{S_1(z)}{\lambda_1(z)} = \frac{S_2(z)}{\lambda_2(z)} \Rightarrow \Delta_2(z) = \lambda_2(z)S_1(z) - S_2(z)\lambda_1(z) = 0 \Rightarrow E_1 = \pm(2\delta + \zeta + 2) \quad (3.124)$$

$$\frac{S_2(z)}{\lambda_2(z)} = \frac{S_3(z)}{\lambda_3(z)} \Rightarrow \Delta_3(z) = \lambda_3(z)S_2(z) - S_3(z)\lambda_2(z) = 0 \Rightarrow E_2 = \pm(2\delta + \zeta + 4) \quad (3.125)$$

Selon les formes des énergies $E_0, E_1, et E_2$, nous pouvons écrire les valeurs propres sous la forme générale :

$$E_{n''} = \pm(2\delta + \zeta + 2n''), n'' = 0, 1, 2, \dots \quad (3.126)$$

on utilise le premier terme de l'équation (3.107), nous obtenons la relation :

$$m^2 = v^2 E_{n''}^2 = v^2 (2\delta + \zeta + 2n'')^2 \quad (3.127)$$

Cette dernière équation nous permet de remplacer la constante de séparation m^2 dans l'équation (3.99), de sorte que les valeurs propres de l'opérateur I_0 pour la deuxième partie angulaire de l'équation de Schrödinger est s'écrit sous la forme :

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

$$E_{n n' n''} = 4\hbar \sqrt{\frac{E}{A}} \left[n + \left(n' + \left(\frac{v^2(2\delta + \zeta + 2n'')^2 + a/\hbar^2 + (v^2(2\delta + \zeta + 2n'')^2 + a/\hbar^2 - (b/\hbar^2)^2)^{\frac{1}{2}}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{5}{2} \right] \quad (3.128)$$

Si l'on pose $x = z^2$, l'équation différentielle (3.121) se transforme à une équation différentielle hypergéométrique [57]. Et sa solution est donnée par

$$\chi(z) = {}_2F_1\left(-n'', 2\delta + \zeta + 2n''; \zeta + \frac{1}{2}; z^2\right) \quad (3.129)$$

${}_2F_1$: Fonction hypergéométrique.

Donc, on obtient la solution de l'équation (3.105) sous la forme :

$$h(\varphi) = N_{n''} (\cos(v\varphi))^\zeta (\sin(v\varphi))^{2\delta} {}_2F_1\left(-n'', 2\delta + \zeta + n''; \zeta + \frac{1}{2}; \cos(v\varphi)^2\right) \quad (3.130)$$

où $N_{n''}$ est la constante de normalisation de la fonction d'onde angulaire $h(\varphi)$. cette constante est calculée à partir de la normalisation :

$$\int_0^{2\pi} |h(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \quad (3.131)$$

en utilisant la relation d'orthogonalité des polynômes de Jacobi [57,58] suivante :

$$\int_0^1 z^{\gamma-1} (1-z)^{s-\gamma} [{}_2F_1(-n, n+s; \gamma; z)]^2 dz = \frac{n!}{(s+2n)} \frac{\Gamma(\gamma)^2 \Gamma(n+s-\gamma+1)}{\Gamma(n+s) \Gamma(s+\gamma)} \quad (3.132)$$

La constante de normalisation devient :

$$N_{n''} = \left(\frac{(2\delta + \zeta + 2n'') \Gamma(2\delta + \zeta + 2n'') \Gamma(\delta + n'' + \frac{1}{2})}{2n''! \Gamma(\zeta + \frac{1}{2})^2 \Gamma(\delta + n'' + \frac{1}{2})} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.133)$$

Par conséquent, les états propres de l'invariante I_0 sont représentés sous la forme :

$$\phi'_{n n' n''}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{(2n'+2m_1+1)\Gamma(n'+1)\Gamma(n'+2m_1+1)}{2^{2m_1+1}\Gamma(n'+m_1+m_2+1)\Gamma(n'+m_1-m_2+1)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{(2\delta + \zeta + 2n'') \Gamma(2\delta + \zeta + 2n'') \Gamma(\delta + n'' + \frac{1}{2})}{2n''! \Gamma(\zeta + \frac{1}{2})^2 \Gamma(\delta + n'' + \frac{1}{2})} \right)^{\frac{1}{2}} \times$$

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

$$\sqrt{2 \left(\frac{E}{A}\right)^{\frac{\alpha}{2}+1} \frac{\Gamma(n)}{\hbar^{\alpha+2}(2n+\alpha+1)\Gamma(n+\alpha+1)}} r^{\alpha+\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2\hbar}\sqrt{\frac{E}{A}}r^2} L_n^\alpha\left(\frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{E}{A}}r^2\right) (1 - \cos\theta)^{(m_1+m_2)/2} (1 + \cos\theta)^{(m_1-m_2)/2} p_{n'}^{(m_1+m_2, m_1-m_2)}(\cos\theta) (\cos\nu\varphi)^\zeta (\sin\nu\varphi)^{2\delta} {}_2F_1\left(-n'', 2\delta + \zeta + n''; \zeta + \frac{1}{2}; \cos^2\nu\varphi\right) \quad (3.134)$$

Les états propres normalisés complètes pour $I(t)$ sont donc évalués comme suit :

$$\phi_{n n' n''}(r, \theta, \varphi) = U^{-1} \phi'_{n n' n''}(r, \theta, \varphi) \quad (3.135)$$

$$\Phi_{n n' n''}(r, \theta, \varphi) =$$

$$\left(\frac{(2n'+2m_1+1)\Gamma(n'+1)\Gamma(n'+2m_1+1)}{2^{2m_1+1}\Gamma(n'+m_1+m_2+1)\Gamma(n'+m_1-m_2+1)}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{(2\delta+\zeta+2n'')\Gamma(2\delta+\zeta+2n'')\Gamma(\delta+n''+\frac{1}{2})}{2n''!\Gamma(\zeta+\frac{1}{2})^2\Gamma(\delta+n''+\frac{1}{2})}\right)^{\frac{1}{2}} \times$$

$$\sqrt{2 \left(\frac{E}{A}\right)^{\frac{\alpha}{2}+1} \frac{\Gamma(n)}{\rho^{2(\alpha+1)}\hbar^{\alpha+2}(2n+\alpha+1)\Gamma(n+\alpha+1)}} r^{\alpha+\frac{1}{2}} e^{-\frac{i\mu_2}{2\hbar\mu_1}r^2} e^{-\frac{1}{2\hbar\rho^2}\sqrt{\frac{E}{A}}r^2} L_n^\alpha\left(\frac{1}{\hbar\rho^2}\sqrt{\frac{E}{A}}r^2\right) \times (1 - \cos\theta)^{(m_1+m_2)/2} (1 + \cos\theta)^{(m_1-m_2)/2} p_{n'}^{(m_1+m_2, m_1-m_2)} \times$$

$$(\cos\theta) (\cos\nu\varphi)^\zeta (\sin\nu\varphi)^{2\delta} {}_2F_1\left(-n'', 2\delta + \zeta + n''; \zeta + \frac{1}{2}; \cos^2\nu\varphi\right) \quad (3.136)$$

3.5 La phase totale et la solution de l'équation de Schrödinger

Il nous reste à déterminer la phase $\xi_{n n' n''}(t)$ qui satisfait l'équation (3.18).

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \xi_{n n' n''}(t) = \langle \phi_{n n' n''}(t) | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) | \phi_{n n' n''}(t) \rangle \quad (3.137)$$

Appliquons la transformation unitaire $U(t)$ à gauche et à droite de cette équation devient :

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \xi_{n n' n''}(t) = \langle \phi_{n n' n''}(r, \theta, \varphi) | -\frac{A}{\rho^2(t)} I_0 - \frac{C}{A} \frac{\rho'}{\rho} | \phi_{n n' n''}(r, \theta, \varphi) \rangle \quad (3.138)$$

Ensuite, nous obtenons la phase associée à l'hamiltonien \tilde{H} sous la forme :

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

$$\xi_{n n' n''}(t) = -E_{nn'n''} \int_0^t \frac{A(t')}{\rho^2(t')} dt' + \frac{i}{2} \int_0^t \frac{\rho'(t')}{\rho(t')} dt' \quad (3.139)$$

Puis, à l'aide de l'équation (3.99), cette équation est évaluée et finalement, on obtient la phase sous la forme :

$$\xi_{n n' n''}(t) = -4\hbar \sqrt{\frac{E}{A}} \left[n + \left(n' + \left(\frac{v^2(2\delta+\zeta+2n'')^2+a/\hbar^2+(v^2(2\delta+\zeta+2n'')^2+a/\hbar^2-(b/\hbar^2)^2)^{\frac{1}{2}}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\frac{1}{2} \right)^2 + \frac{5}{2} \int_0^t \frac{A(t')}{\rho^2(t')} dt' + \frac{i}{2} \int_0^t \frac{\rho'(t')}{\rho(t')} dt' \right] \quad (3.140)$$

Par conséquent, en substituant les équations (3.135) et (3.140) dans la fonction $\psi_{nn'n''}(r, \theta, \varphi) = e^{i\theta_{nn'n''}(t)} \phi_{nn'n''}(r, \theta, \varphi)$, les solutions exactes d'ordre n de l'équation de Schrödinger originale (3.2) associé à l'Hamiltonien $H(r, p, \theta, \varphi, t)$ sont évaluées par :

$$\begin{aligned} \psi_{nn'n''}(r, \theta, \varphi) = & \left(\frac{(2n'+2m_1+1)\Gamma(n'+1)\Gamma(n'+2m_1+1)}{2^{2m_1+1}\Gamma(n'+m_1+m_2+1)\Gamma(n'+m_1-m_2+1)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{(2\delta+\zeta+2n'')\Gamma(2\delta+\zeta+2n'')\Gamma(\delta+n''+\frac{1}{2})}{2n''!\Gamma(\zeta+\frac{1}{2})^2\Gamma(\delta+n''+\frac{1}{2})} \right)^{\frac{1}{2}} \times \\ & \sqrt{2 \left(\frac{E}{A} \right)^{\frac{\alpha}{2}+1} \frac{\Gamma(n)}{\rho^{2(\alpha+1)}\hbar^{\alpha+2}(2n+\alpha+1)\Gamma(n+\alpha+1)}} r^{\alpha+\frac{1}{2}} e^{-\frac{i\mu_2}{2\hbar\mu_1}r^2} e^{-\frac{1}{2\hbar\rho^2}\sqrt{\frac{E}{A}}r^2} L_n^\alpha \left(\frac{1}{\hbar\rho^2}\sqrt{\frac{E}{A}}r^2 \right) \times (1 - \\ & \cos\theta)^{(m_1+m_2)/2} (1 + \cos\theta)^{(m_1-m_2)/2} p_n^{(m_1+m_2, m_1-m_2)} \times \\ & (\cos\theta)(\cos v\varphi)^\zeta (\sin v\varphi)^{2\delta} {}_2F_1 \left(-n'', 2\delta + \zeta + n''; \zeta + \frac{1}{2}; \cos^2 v\varphi \right) e^{i\xi_{nn'n''}(t)} \end{aligned} \quad (3.141)$$

Où la phase totale est donnée par l'expression :

$$\theta_{n n' n''}(t) = -4\hbar \sqrt{\frac{E}{A}} \left[n + \left(n' + \left(\frac{v^2(2\delta+\zeta+2n'')^2+a/\hbar^2+(v^2(2\delta+\zeta+2n'')^2+a/\hbar^2-(b/\hbar^2)^2)^{\frac{1}{2}}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\frac{1}{2} \right)^2 + \frac{5}{2} \int_0^t \frac{A(t')}{\rho^2(t')} dt' + \frac{1}{\hbar} \int_0^t \frac{2CB}{A} dt' \right] \quad (3.142)$$

Chapitre 03 : Solution de Schrödinger pour un potentiel non central dépendant du temps

Ce sont les résultats fondamentaux de notre recherche, qui sont les fonctions d'onde du système qui satisfont l'équation de Schrödinger. Bien que la solution est compliquée, celle-ci nous permet d'étudier les diverses caractéristiques quantiques du système, tels que l'évolution temporelle des variables canoniques et autres observables, le spectre des états propres de l'énergie, les relations d'incertitude, la densité de probabilité, etc...

Conclusion

Dans ce mémoire, après avoir donné un aperçu général sur l'apparition de l'équation de Schrödinger, on a présenté en détail un modèle mathématique très intéressant et qui montre ces succès successives quand il est utilisé pour traiter analytiquement pas mal de problèmes de la physique théorique dans les dernières années ; c'est la méthode des invariants. Nous nous avons appliqué cette méthode pour un potentiel non central dépendant du temps très compliqué qui est décrit par l'hamiltonien suivant :

$$H(t) = A \left(p^2 + \frac{f(\theta, \varphi)}{r^2} \right) + B(rp_r + p_r r) + Dr^2 + \frac{E}{r^2} + C \left(\frac{1}{r} p_r + p_r \frac{1}{r} \right)$$

L'opérateur invariant est transformé en une forme simple par une transformation unitaire. Les méthodes de Nikiforov-Uvarov et l'itération asymptotique sont utilisées pour résoudre l'équation aux valeurs propres de l'opérateur invariant dans le système transformé.

Le potentiel en forme de double anneau généralisée $V(\varphi)$ d'épandant du temps est considéré comme un cas particulier.

Le spectre d'énergie du système et les fonctions d'onde complètement représentées dans les formules (3.128) et (3.141).

Les propriétés quantiques du système dans les états cohérents, l'étude du propagateur, la phase géométrique et l'entropie du système seront de bons sujets qui peuvent être accomplies sur la base de la fonction d'onde dérivée dans ce travail.

Bibliographie

- [1] H. R. Lewis, Jr., *phys. Rev. let.* 18, 510 (1967).
- [2] M. Sebawe Abdullah, *Phys.Rev.A* 37 (1988) 4026.
- [3] S. L. Altmann, C. J. Bradley, *Proc. Phys. Soc. London* 86, 915 ,(1965).
- [4] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, (Addison-Wesley, 1980).
- [5] L. Landau, E. Lifchitz, *Mecanique*, (Editions Mir, Moscou, 1988).
- [6] W. Greiner, *Quantum Mechanics: 4 Ed*, (Springer, Germany, 2000)
- [7] C.C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloe-*Mecanique Quantique-T1 et T2- Hermann, Paris,*
nouvelle édition revue, corrigée et augmentée 1977.
- [8] A.A. Makarov and Al., *Nuovo Cimento A* 52, 1061(1967).
- [9] I.S.GradshTEyn and I.M.Ryznik, *Tables of Integrals, Series and Product*, 6th ed. Academic
Press, Ney York, (2000).
- [10] C.J. ganison and E.M.Wright, *Phys.Lett.A* 128 (1988) 177.
- [11] M. Kossow, *Annal.Phys*, 18N5; 285-377(2009).
- [12] R.M.Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Combridge
University Press, Cambridge (2004).
- [13] H.R. Lewis and W.B. Risenfeld, *J. Math. Phys* 10, 1458 (1969).
- [14] L. Krache, thèse de doctorat, Université de Sétif (2010).
- [15] A.M. Markov, *Invariant and the Evolution of Nonstationnary Quantum Systems*, (Nova
Science Publishers, Commack, New York, 1989).
- [16] C-In. Um, K-H. Yeon and T.F. George, *Phys.Rep.* 362(2002) 63.
- [17] I.A. Pedrosa and I. Guedes, *Int.J.Mod.Phys. B*17 (2003) 2903.
- [18] J.R. Choi and Bo. Ha. Kweon, *Int.J. Mod. Phys. B* 16(2002) 4733.
- [19] M. Maamache, M. Choutri, *J.Phys.A: Math.Gen.*33 (2000) 6203.
- [20] M. Maamache, J.P.Provost and G. Vallée, *Phys.Rev. A*59 (1999)1777.
- [21] M. Maamache, *Phys.Rev. A*52 (1995) 936.
- [22] I.A. Pedrosa, G.P. Sena and I. Guedes, *Phys.Rev A*56(1997)4300.
- [23] D.A.Trifonov, *J.Phys.A: Math.Gen.*32 (1999) 3649.

- [24] V.V. Dodonov, V.I. Man'ko, L. Rosa, Phys.Rev.A57 (1998) 2851.
- [25] M. Maamache, Phys.Rev.A29 (1996) 2833.
- [26] M. Maamache, Phys.Rev.A61 (2000) 026102.
- [27] J.R.Choi, Int.J.Th. Phys.43 (2004)947 ; Phys.Lett.A325 (2004)1.
- [28] V. V. Dodonov, I. A. Malkin, and V. I. Man'ko, Phys.Lett.A, 39 (1972)377.
- [29] J.H. Gweon and J.R. Choi, J.Kor.Phys.Soc, 42(2003) 325.
- [30] D-Y. Song, Phys.Rev.A 62 (2000) 14103.
- [31] D-Y. Song, Phys.Rev.Lett.85 (2000) 1141.
- [32] K.H. Yeon, D.H.Kim, C.I. Um, T.F. George and L.N. pandey, Phys.Rev. A 55 (1997) 023.
- [33] I. Guedes, Phys.Rev.A 63 2(2001)034102.
- [34] J. Bauer, Phys.Rev.A 65 (2002)036101.
- [35] H. bekkar, F.Benamira and M. Maamache; Phys.Rev.A68(2003)016101.
- [36] Pi-G. Luan and C.S. Tang, Phys.Rev.A 71 (2005)1.
- [37] C.J. ganison and E.M.Wright, Phys.Lett.A 128 (1988) 177.
- [38] M. Maamache, A. Bounames and N. ferkous, Phys.Rev.A 731, (2006) 016101.
- [39] M. Maamache, S. Menouar and L. Krache, Int.J.Theor.Phys, 45(2006)2223.
- [40] S.Menouar, M. Maamache and J.R. Choi, Phys.Scr.82 (2009)065004.
- [41] M .Maamache, A. Bounemes and N. Ferkous, Phys .Rev.A, 731(20063).
- [42] F.W. J. Olver, D.W. Lozier, R. F. Boisvert, and C.W. Clark, NIST handbook of mathematical functions (Cambridge University press, New York, 2010).
- [43] Y. Aharonov, D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485(1959)4859.
- [44] B. Gonul and I. Zorbz, Phys. Lett. A **269**, 83(2000).
- [45] S. Flugge, Practical Quantum Machanics I (Springer, Berlin, Heidelberg, New York, (1971).
- [46] H.X. Quan, L. Guang, W.Z. Min, N.L.Bin, M. Commun. Theor. Phys.**53**, 242(2010).
- [47] Z.M.Cang, W.Z. Bang, Chem. Phy. **16**, 1863(2007).

- [48] A.F. Nikiforov and V. B. Uvarov, *Special Function of Mathematical Physics* (Birkhauser Verlag Basel, Germany, (1988).
- [49] F. Calogero, *J. Math. Phys.*10 (1969) 2191; *J. Math. Phys.*12 (1971) 419.
- [50] E. Pinney, *proc. Am. Math. Soc.* 1(1950) 681.
- [51] R. C. Hagen, *Phys. Rev. Lett.* 64 (1990) 503.
- [52] N.Ferkous, A. Bounemes and M.Maamache, *Phys.Scr.*88, 035001(2013).
- [53] A. Khare and Rajat K. Bhaduri, *Am.J.Phys.* 62, 1008(1994).
- [54] S.M. Ikhdair and Ramazan Sever, *C. Eu. J. Phys.* **46**, 1643(2007).
- [55] H. Ciftci, R.L. Hall and N. Saad, *Phys. A: Math. Gen.* 36(47), (2003) 11807.
- [56] H. Ciftci, R.L. Hall and N. Saad, *Phys. Lett. A* 340(5), (2005) 388.
- [57] F.W.J.Olver,D.W.Lozier, R.F.Boisvert and C.W.Clark, *NIST handbook of mathematical functions* (Cambridge University Press, New York, 2010).
- [58] I.S.GradshTEyn and I.M.Ryznik, *Tables of Integrals, Series and Product*, 6th ed. Academic Press, New York, (2000).

Résumé :

Dans ce mémoire, nous avons présenté un traitement analytique d'un problème physique décrit par un potentiel non central dépendant du temps. Pour obtenir les solutions de l'équation de Schrödinger, nous avons utilisé la méthode des invariants. L'opérateur invariant transformé est une forme simple par une transformation unitaire. Les solutions quantiques dans le système transformé sont obtenues facilement parce que l'opérateur invariant dans le système transformé est simple et indépendant du temps. Les méthodes Nikiforov-Uvarov et d'itération asymptotique sont utilisées pour résoudre l'équation aux valeurs propres de l'opérateur invariant dans le système transformé. Le potentiel en forme de double anneau généralisée $V(\varphi)$ dépendant du temps est considéré comme un cas particulier.

Mots clés : potentiel non central, transformation unitaire, théorie des invariants.

Abstract:

In this work, we have presented an analytic treatment of non stationary potential physical system. To obtain wave functions, the invariant operator is transformed to a simple form by unitary transformation. Quantum solutions in the transformed system are easily obtained because the invariant operator in the transformed system is a time independent simple one. The Nikiforov-Uvarov and the asymptotic iteration methods are used for solving eigenvalue equation of the invariant operator in the transformed system. The double ring shaped generalized plus a $V(\varphi)$ non central time-dependent potential is considered as a particular case.

Keywords: non central potential, unitary transformation, invariant theory.

ملخص:

في هذه المذكرة، قمنا بدراسة شاملة ودقيقة لواحدة من مسائل الفيزياء موصوفة بكمون غير مركزي متعلق بالزمن ، من أجل حل معادلة شرودينجر، استخدمنا طريقة الامتغيرات، قمنا بتحويل مؤثر الامتغير المتعلق بالزمن إلى لامتغير غير متعلق بالزمن ، وذلك باستخدام طريقة التحويل الودوي تمكنا من إيجاد الحلول الكوانتية في الجملة المحولة غير المتعلقة بالزمن بطريقة بسيطة، ولحل معادلة القيم الذاتي الامتغير المحول استخدمنا طريقة نيكيفوروف افاروف والتكرار المقارب بأخذ حالة خاصة من الكمون الامركزي ثنائي الحلق $V(\varphi)$ تمكن من إيجاد الحل النهائي للجملة الأصلية.

كلمات مفتاحية : كمون لامركزي، التحويل الودوي، نظرية الامتغيرات.