

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT PHYSIQUE
N° Ph/TH/10/2022



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : PHYSIQUE THEORIQUE

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par : TOUMI Soumia

Intitulé

**La solution de l'équation de Schrödinger pour
le potentiel de Morse généralisé utilisant la
méthode de l'analyse fonctionnelle de
Nikiforov–Uvarov (NUFA)**

Soutenu le 20/ 06 /2022 devant le jury composé de :

Maireche Abdelmadjid

Université M'sila

Président

Medjber Salim

Université M'sila

Rapporteur

Goumaid Ali

Université M'sila

Examineur

Année universitaire : 2021/2022

Remerciements

Je remercie Dieu Tout Puissant sa grâce et sa générosité de compléter cette mémoire, qui nous a inspirés avec la santé, le courage et la patience. Dieu merci.

Je tiens à exprimer mes sincères remerciements et ma gratitude au Professeur Dr Medjber Salim Pour tous ses conseils et informations qui ont contribué à enrichir le sujet de notre étude dans ses différents aspects.

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

Je désire également adresser des remerciements à tous les professeurs du département de physique.

J'adresse aussi mes remerciements à tous les enseignants qui, par leurs enseignements, leurs encouragements et leurs aides, ont contribué à ma formation durant tous mes études dès le primaire à l'université.

Toumi soumia

Dédicace

Je dédie ce travail

A la personne la plus précieuse de ma vie, À qui tout était dans ma vie
et qui est encore, ...mon cher père.

Aux âmes qui nous ont quittés un jour... ma mère et ma grand-mère.

(Que Dieu ait pitié d'elles)

A mes très chères sœurs : Aicha, Hadjira, Sarah, Amna.

A mes très chers frères : Mohammed, Habib, Ibrahim, Anas.

Ala femme de mon père, et la femme de mon frère et ses enfants :

Hamoudi, yasmin.

Ames chères cousines : Mariam, Khadija, Chaima.

A tous mes collègues la promotion de physique 2021_2022

Toumi soumia

Sommaire

Introduction Générale	6
Introduction.....	7
Chapitre I	9
L'équation de Schrödinger	9
1-introduction	10
2-Construction de l'équation de Schrödinger	10
3-Solution de l'équation de Schrödinger.....	13
3.1-Introduction	13
3.2-La fonction d'onde	13
3.3-L'équation de Schrödinger stationnaire.....	13
3.2.2-L'équation de Schrödinger stationnaire à deux dimensions	14
4-Les méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire.....	16
4. 1-Méthodes numériques.....	16
4.2-Méthodes analytiques.....	16
Chapitre II	21
La méthode de Nikiforov-Uvarov et la méthode d'analyse fonctionnelle de Nikiforov-Uvarov	21
1-La méthode de Nikiforov-Uvarov (NU)	22
2-La méthode d'analyse fonctionnelle de Nikiforov-Uvarov (NUAF).....	26
2.1-Introduction	26
2.2-La théorie de la méthode d'analyse fonctionnelle de Nikiforov-Uvarov (NUAF)	27
3-Quelques applications.....	30
3.1-Le potentiel de Yukawa.....	31
3.2-Le potentiel de Kratzer filtré	33
3.3-Le potentiel de Hellman	34
3.4-Le potentiel de Woods-Saxon déformé	36
Chapitre III	39
Solution de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse	39
généralisé	39
Solutions de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse généralisé	40
1-Introduction	40
2-Le potentiel de Morse généralisé	40
3-Solutions de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse généralisé	40
Conclusion	44
Conclusion	45

Références bibliographiques 46
Références bibliographiques 47

Introduction Générale

Introduction

L'équation de Schrödinger joue un rôle fondamental en mécanique quantique car c'est elle qui régit l'évolution dans le temps du système physique. Depuis la publication du travail de Schrödinger [1], les physiciens théoriciens se sont penchés à trouver les solutions analytiques pour l'équation de Schrödinger pour différents systèmes physiques. À partir de ces solutions on obtient une fonction d'onde qui nous permet d'identifier le système quantique étudié. La connaissance de la solution de Schrödinger l'équation a donné toutes les informations possibles, en ce qui concerne les propriétés physiques de tout système considéré. Ceux-ci inclure l'énergie, la quantité de mouvement et la coordonnée de la particule dans le système, la fréquence et la longueur d'onde qui décrivent le système dans la mécanique quantique, l'amplitude et la phase de probabilité de la fonction d'onde, etc. [2]. La solution de l'équation de Schrödinger a de nombreuses applications dans différents domaines de la physique, notamment physique atomique, physique nucléaire, physique de la condensation et des hautes énergies, physique des particules, physique chimique, etc [3].

La solution analytique exacte de l'équation de Schrödinger n'est possible qu'avec le moment cinétique $l = 0$ (l'onde s) pour quelques modèles potentiels. Cependant, pour les états $l \neq 0$, il faut employer quelques approximations, telle que l'approximation de Pekeris [4], pour traiter le terme centrifuge d'orbite ou résoudre numériquement [5].

L'équation de Schrödinger avec beaucoup de modèles des potentiels a été étudié récemment avec différentes méthodes analytiques telles que la méthode Nikiforov-Uvarov (NU) [6], la méthode d'itération asymptotique (AIM) [7], mécanique quantique supersymétrique (SUSYQM) [8], l'approche de l'intégrale de chemin [9], l'approche algébrique [10], et d'autres méthodes [11]. L'un de ces modèles potentiels est le potentiel Morse généralisé. Le potentiel de Morse généralisé a été proposé par Deng et Fan [12] et il a d'abord été appelé le potentiel de Morse modifié pour décrire les spectres d'énergie moléculaire diatomique et la transition électromagnétique. Le nom ultérieur (Morse généralisé) a été appelé par Mesa et al. [13].

Récemment, une méthode alternative a été proposée pour résoudre l'équation de Schrödinger. La méthode s'appelle la méthode d'analyse fonctionnelle NU (NUFA). En utilisant les concepts de la méthode NU [14] de la méthode NU paramétrique [15] et la méthode d'analyse fonctionnelle [16], Ikot et al. [17] ont proposé une méthode simple et élégante pour résoudre une équation différentielle du second ordre de type hypergéométrique appelée la méthode d'analyse fonctionnelle de Nikiforov-Uvarov (NUFA). Cette méthode est facile et simple tout comme la méthode NU paramétrique. Contrairement à la méthode NU qui consistait à rechercher le carré

des polynômes et d'autres conditions qui le compliquent, la méthode NUFA est très facile à utiliser pour obtenir l'énergie et la fonction d'onde une fois les équations d'onde correctement transformées et les singularités identifiées.

Ceci nous a motivé d'étudier la solution de l'équation Schrödinger stationnaire pour le potentiel de Morse généralisé par cette nouvelle méthode.

Notre mémoire de master est structuré comme suit :

Avant d'aborder le sujet, on va d'abord faire un bref rappel sur l'équation de Schrödinger stationnaire et ainsi les méthodes de leurs résolutions. Dans le deuxième chapitre nous avons expliqué les principes de deux méthodes ; La méthode Nikiforov-Uvarov (NU) paramétrique et la méthode d'analyse fonctionnelle de Nikiforov-Uvarov (NUFA). Le troisième chapitre est consacré à l'étude quantique d'un potentiel central à trois dimensions de Morse généralisé. On termine par une conclusion.

Chapitre I

L'équation de Schrödinger

1-introduction

En physique quantique, en vertu de la dualité onde-corpuscule, la particule est décrite par une fonction d'onde dont nous décrirons la signification et l'équation qui donne son évolution spatiale et temporelle (l'équation de Schrödinger).

L'équation de Schrödinger a été proposée de façon inductive par Erwin Schrödinger en 1925 [1]. C'est une équation fondamentale de la mécanique quantique non relativiste. Sa forme générale est une équation aux dérivées partielles du premier ordre par rapport au temps, et du second ordre par rapport aux coordonnées de l'espace ordinaire. L'équation de Schrödinger joue un rôle fondamental en mécanique quantique par analogue à l'équation de Newton en mécanique classique, car c'est elle qui régit l'évolution dans le temps du système physique.

2-Construction de l'équation de Schrödinger

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

Le physicien autrichien Erwin Schrödinger utilisa les résultats de De Broglie pour établir une équation régissant l'évolution spatiale et temporelle de la fonction d'onde d'un système physique [1].

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

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

Dans la suite, il sera plus intéressant de considérer la pulsation ω et le nombre d'onde K . Une particule libre est caractérisée par son énergie et son impulsion. La correspondance entre les concepts corpusculaires et ondulatoires est assurée par les deux importantes relations suivantes :

La relation de Planck-Einstein :

$$E = \hbar\omega, \quad (\text{I-2})$$

et la relation de L. De Broglie :

$$\vec{P} = \hbar\vec{k}, \quad (\text{I-3})$$

alors:

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{P}\vec{r}-Et)/\hbar}. \quad (\text{I-4})$$

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

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

donc :

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

d'où :

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

\hat{E} : est l'opérateur d'énergie.

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

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

où :

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

est l'opérateur gradient, alors :

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

est l'opérateur d'impulsion.

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

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

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

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

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

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

d'où

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

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

Donc l'équation de Schrödinger devienne :

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

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

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

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

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

Lorsque la particule est plongée dans un potentiel scalaire (par exemple le potentiel d'un oscillateur harmonique) d'après la mécanique classique, l'énergie totale du système s'écrit comme suit:

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

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

l'équation de Schrödinger devient :

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

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

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

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

$$\hat{H}\psi(\vec{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t). \quad (\text{I-20})$$

3-Solution de l'équation de Schrödinger

3.1-Introduction

Depuis la publication du travail de Schrödinger, les physiciens théoriciens se sont penchés à trouver des solutions à partir des plusieurs méthodes mathématiques pour résoudre l'équation de Schrödinger, soit analytique ou numérique, à partir de cette solution, on obtient une fonction d'onde qui nous permet d'identifier le système quantique étudié [18].

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

3.2-La fonction d'onde

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

La fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ doit satisfaire les conditions suivantes [19]:

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

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

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

$$\int \psi^* \psi d^3 r = \int |\psi|^2 d^3 r = 1 , \quad (\text{I-21})$$

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

3.3-L'équation de Schrödinger stationnaire

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 ordinaire. Si l'hamiltonien du système physique ne dépend pas explicitement du temps, l'équation de Schrödinger est dite stationnaire, dans ce cas l'énergie totale est conservée, donc l'équation de Schrödinger admet des solutions particulières sous forme [19] :

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

où E : l'énergie, et $\psi(r)$ satisfait l'équation de Schrödinger stationnaire :

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

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

Si une particule de masse m se déplaçant sur l'axe x , soumise à une potentiel $V(x)$, pour déterminer les niveaux d'énergie, et les fonctions d'ondes associées nous devons résoudre l'équation de Schrödinger unidimensionnelle suivante [19]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \varphi(x) = E\varphi(x) , \quad (\text{I-24})$$

où $-\infty < x < +\infty$.

3.2.2-L'équation de Schrödinger stationnaire à deux dimensions

Dans ce cas le potentiel dépend de deux dimensions, et l'équation de Schrödinger s'écrit comme suit [19]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \right] \varphi(x, y) = E\varphi(x, y) . \quad (\text{I-25})$$

3.2.3-L'équation de Schrödinger stationnaire à trois dimensions

Dans ce cas la particule se déplaçant dans un potentiel qui dépend de \vec{r} ($V(\vec{r})$) qui soit central où non central. Il est préférable d'utiliser les coordonnées sphériques qui sont mieux adaptées à laplacien Δ qui s'écrit [19]:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} , \quad (\text{I-26})$$

avec :

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] , \quad (\text{I-27})$$

où L : est l'opérateur du moment cinétique et $0 < r < +\infty$, et θ, φ sont les angles polaires $0 \leq \theta \leq \pi$ et $0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(\vec{r}) , \quad (\text{I-28})$$

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

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right\} \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) . \quad (\text{I-29})$$

a) La séparation des variables

L'expression (I-27) montre que toute la dépendance en θ, φ est contenue dans l'opérateur L^2 et on a $[H, L^2] = 0$ et $[H, L_z] = 0$. Les trois observables H, L^2, L_z admettent un système complet de fonctions propres [19]; de sorte que l'on a

$$H\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) , \quad (\text{I-30})$$

$$L^2\psi(r, \theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2\psi(r, \theta, \varphi) , \quad (\text{I-31})$$

$$L_z\psi(r, \theta, \varphi) = m\hbar\psi(r, \theta, \varphi) . \quad (\text{I-32})$$

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

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) , \quad (\text{I-33})$$

en utilisant le fait que :

$$\begin{aligned} L^2\psi(r, \theta, \varphi) &= L^2R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = R(r)L^2Y_l^m(\theta, \varphi) \\ &= l(l+1)\hbar^2R(r)Y_l^m(\theta, \varphi) , \end{aligned} \quad (\text{I-34})$$

on aboutit à l'équation radiale suivante :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right\} R(r) = ER(r) , \quad (\text{I-35})$$

où encore

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] \right\} R(r) = 0 , \quad (\text{I-36})$$

avec l : est le nombre quantique orbital.

À cause de l'interprétation probabiliste due à M. Born en 1926 [20] des fonctions d'onde, les solutions de l'équation de Schrödinger doivent appartenir à l'espace de Hilbert. En plus de l'équation de Schrödinger, les solutions de cette dernière doivent vérifier l'équation de continuité suivante [21]:

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \vec{J}(\vec{r}, t) = 0, \quad (\text{I-37})$$

avec

$$\rho(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t)^* \psi(\vec{r}, t), \quad (\text{I-38})$$

représente la densité de probabilité et

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}, t)], \quad (\text{I-39})$$

est le vecteur de la densité de courant.

4-Les méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire

Il ya deux type de méthodes pour résoudre l'équation de Schrödinger : méthodes numériques et méthodes analytiques.

4. 1-Méthodes numériques

On cite par exemple :

- Méthode d'Euler
- Heun
- Euler améliorée
- Runge et Kutta
- Approximations successives... [22].

4.2-Méthodes analytiques

4.2.1- la méthode de perturbation

a-Principe de la méthode

Cette méthode s'applique dans le cas d'un système stationnaire ou l'Hamiltonien est écrit sous la forme [23]:

$$H = H_0 + W, \quad (\text{I-40})$$

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

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

Pour assurer que W est plus petit que H_0 on introduit un paramètre réel λ , que l'on l'impose d'être ($\lambda \ll 1$), ce qui permet d'écrire :

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V, \quad (\text{I-41})$$

V est de l'ordre de H_0 .

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

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

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

a.1-Valeurs propres de $H(\lambda)$

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

$$H(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle, \quad (\text{I-42})$$

En remplaçant $H(\lambda)$ par l'expression (1-41), l'équation (1-42) devient:

$$(H_0 + \lambda V) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle. \quad (\text{I-43})$$

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

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda \varepsilon_1 + \lambda^2 \varepsilon_2 + \dots + \lambda^p \varepsilon_p + \dots = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \varepsilon_p, \quad (\text{I-44})$$

et

$$|\psi(\lambda)\rangle = |\psi^0\rangle + \lambda |\psi^1\rangle + \dots + \lambda^p |\psi^p\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\psi^p\rangle. \quad (\text{I-45})$$

Nous reportons ces développements dans l'équation (1-43), on obtient :

$$(H_0 + \lambda V) \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\psi^p\rangle \right) = \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \varepsilon_p \right) \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\psi^p\rangle \right). \quad (\text{I-46})$$

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

Pour les termes d'ordre 0 : (λ^0)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |\psi^0\rangle = 0 . \quad (\text{I-47})$$

Pour les termes d'ordre 1: (λ^1)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |\psi^1\rangle + (W - \varepsilon_1) |\psi^0\rangle = 0 . \quad (\text{I-48})$$

Pour les termes d'ordre 2: (λ^2)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |\psi^2\rangle + (W - \varepsilon_1) |\psi^1\rangle - \varepsilon_2 |\psi^0\rangle = 0 . \quad (\text{I-49})$$

Pour les termes d'ordre p : (λ^p)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |\psi^p\rangle + (V - \varepsilon_1) |\psi^{p-1}\rangle - \varepsilon_2 |\psi^{p-2}\rangle - \dots - \varepsilon_p |\psi^0\rangle = 0 . \quad (\text{I-50})$$

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

b-La correction d'énergie

On a trouvé la correction à l'énergie d'ordre 1 jusqu' à l'ordre 2 par la projection des équations de perturbation (1-47) sur l'état $|\psi^0\rangle$ qui donne en tenant compte ,

$$\langle \psi^0 | \psi^0 \rangle = 1 . \quad (\text{I-51})$$

La correction au premier ordre à l'énergie non dégénéré est égale à la valeur moyenne de la perturbation W dans l'état non-perturbé $|\phi_n\rangle$, Donc :

$$\varepsilon_1 = \langle \psi^0 | V | \psi^0 \rangle = \langle \phi_n | V | \phi_n \rangle , \quad (\text{I-52})$$

avec:

$$H_0 |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle . \quad (\text{I-53})$$

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

$$\varepsilon_2 = \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{|\langle \phi_n | V | \phi_m^{\alpha} \rangle|^2}{E_n - E_m} . \quad (\text{I-54})$$

c-La correction au vecteur propre

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

$$|\psi^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | V | \phi_n \rangle|^2}{E_n - E_m} |\phi_m\rangle . \quad (\text{I-55})$$

La correction au 2^{ème} ordre est:

$$|\psi^2\rangle = \sum_{m \neq p} \sum_{n \neq p} \left(\frac{\langle \phi_m | V | \phi_n \rangle}{(E_p - E_m)(E_p - E_n)} - \frac{\langle \phi_p | V | \phi_p \rangle}{(E_p - E_m)^2} \right) |\phi_m\rangle . \quad (\text{I-56})$$

Les valeurs propres et les vecteurs propres de l'Hamiltonien perturbé H s'obtiennent en utilisant les développements (1-44) et (1-45). On obtient donc :

$$|\psi\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_n | W | \phi_m \rangle|^2}{E_n - E_m} |\phi_m\rangle + \dots \quad (\text{I-57})$$

et

$$E = E_n + \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_n | W | \phi_m \rangle|^2}{E_n - E_m} + \dots \quad (\text{I-58})$$

4.2-2- la méthode variationnelle

On sait que la méthode des perturbations stationnaire nécessite la connaissance des valeurs propres et des vecteurs propres associés au Hamiltonien non perturbé H_0 , mais quand on ne peut pas décomposer le hamiltonien total H du système en une partie principale H_0 et une perturbation W , ce qui rend la résolution de l'équation aux valeurs propres de H très difficile [23]. Dans ce cas, il nécessite de connaître l'énergie de l'état fondamental, donc pour résoudre ce problème on a alors recours à la méthode variationnelle [24], qu'est un outil d'approximation simple mais très utile dans de nombreux problèmes de physique quantique ou il est très difficile à connaître la solution exacte. Elle est basée sur des étapes mathématique que nous allons résumés comme suit [25] :

a-Principe de la méthode

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

Donc on a:

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle . \quad (\text{I-59})$$

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

$$|\psi\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n | \psi \rangle , \quad (\text{I-60})$$

et : $E_0 \leq E_n$

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

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} . \quad (\text{I-61})$$

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

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_n E_n |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2 \geq E_0 \sum_n |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2 \\ &= E_0 \langle \psi | \psi \rangle . \end{aligned} \quad (\text{I-62})$$

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

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 , \quad (\text{I-63})$$

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

Il ya d'autres méthodes telles que la supersymétrie quantique [26], la méthode Nikiforov-Uvarov (NU) [15] et la méthode d'analyse fonctionnelle de Nikiforov-Uvarov (NUFA) [17]. Dans le deuxième chapitre en détaille les deux dernières méthodes.

Chapitre II

La méthode de Nikiforov- Uvarov et la méthode d'analyse fonctionnelle de Nikiforov–Uvarov

1-La méthode de Nikiforov-Uvarov (NU)

La méthode (NU) 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 $s = s(r)$ comme suit [11] :

$$\psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\psi(s) = 0, \quad (\text{II-1})$$

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 :

$$\psi(s) = \emptyset(s)y(s), \quad (\text{II-2})$$

l'équation. (II-1) devienne :

$$\sigma(s)y''(s) + \tau(s)y'(s) + \nu y(s) = 0, \quad (\text{II-3})$$

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

$$\frac{\emptyset(s)'}{\emptyset(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)'} \quad (\text{II-4})$$

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

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s)\rho(s)], \quad (\text{II-5})$$

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

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho. \quad (\text{II-6})$$

dans cette méthode, on définit la fonction π et le paramètre ν comme suit:

$$\pi(s) = \frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma} - k\sigma}, \quad (\text{II-7})$$

$$\nu = k + \pi'. \quad (\text{II-8})$$

Pour 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 devienne :

$$\nu = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma'', \quad (\text{II-9})$$

où

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s), \quad (\text{II-10})$$

et sa dérivée est négative.

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

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1 - \alpha_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{s^2(1 - \alpha_3 s)^2} \right] \psi = 0. \quad (\text{II-11})$$

Nous pouvons résoudre ceci comme suit. Lorsque l'éq. (II-11) est comparée avec l'éq. (II-1), nous obtenons

$$\tilde{\tau} = \alpha_1 - \alpha_2 s, \quad (\text{II-12})$$

et

$$\sigma = s(1 - \alpha_3 s), \quad (\text{II-13})$$

et aussi

$$\tilde{\sigma} = -\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3, \quad (\text{II-14})$$

en substituent ceux-ci dans l'éq. (II-7), on obtient

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5 s \pm \sqrt{(\alpha_6 - k\alpha_3)s^2 + (\alpha_7 + k)s + \alpha_8}, \quad (\text{II-15})$$

où

$$\alpha_4 = \frac{1}{2}(1 - \alpha_1), \quad (\text{II-16})$$

$$\alpha_5 = \frac{1}{2}(\alpha_2 - 2\alpha_3), \quad (\text{II-17})$$

$$\alpha_6 = \alpha_5^2 + \xi_1, \quad (\text{II-18})$$

$$\alpha_7 = 2\alpha_4\alpha_5 - \xi_2, \quad (\text{II-19})$$

$$\alpha_7 = 2\alpha_4\alpha_5 - \xi_2, \quad (\text{II-20})$$

$$\alpha_8 = \alpha_4^2 + \xi_3. \quad (\text{II-21})$$

Dans l'éq. (II-15), la fonction sous la racine carrée doit être le carré d'un polynôme conformément à la méthode de (NU), de telle sorte que

$$k_{1,2} = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) \mp 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9}, \quad (\text{II-22})$$

où, nous définissons

$$\alpha_9 = \alpha_3\alpha_7 + \alpha_3^2\alpha_8 + \alpha_6. \quad (\text{II-23})$$

Pour chaque K les fonctions π sont obtenues. Pour

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) - 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9}, \quad (\text{II-24})$$

π devienne

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5s - \left[\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) s - \sqrt{\alpha_8} \right]. \quad (\text{II-25})$$

Pour le même K , pour les éqs. (II-10), (II-12) et (II-25)

$$\tau = \alpha_1 + 2\alpha_4 - (\alpha_2 - 2\alpha_5)s - 2\left[\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) s - \sqrt{\alpha_8} \right], \quad (\text{II-26})$$

et

$$\tau' = -(\alpha_2 - 2\alpha_5) - 2\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) = -2\alpha_3 - 2\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) < 0, \quad (\text{II-27})$$

sont obtenues. Quant l'éq. (II-8) est utilisée avec l'éq. (II-26) et l'éq. (II-27) l'équation suivante est dérivée:

$$\alpha_2n - (2n + 1)\alpha_5 + (2n + 1)\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right) + n(n - 1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} = 0. \quad (\text{II-28})$$

Cette équation donne le spectre de l'énergie pour le problème donné. Pour l'éq. (II-6)

$$\rho(s) = s^{\alpha_{10}-1} (1 - \alpha_3s)^{\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1}, \quad (\text{II-29})$$

est trouvé et lorsque cette équation est utilisée dans l'éq. (II-5)

$$y_n = P_n^{\left(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1 \right)} (1 - 2\alpha_3s), \quad (\text{II-30})$$

est obtenue, où,

$$\alpha_{10} = \alpha_1 + 2\alpha_4 + 2\sqrt{\alpha_8}, \quad (\text{II-31})$$

et

$$\alpha_{11} = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2\left(\sqrt{\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}} \right). \quad (\text{II-32})$$

$P_n^{(\alpha,\beta)}$ sont les polynômes de Jacobi. Utilisant l'éq. (II-4),

$$\phi(s) = s^{\alpha_{12}}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}}, \quad (\text{II-33})$$

est obtenue et la solution générale devienne

$$\psi = \phi(s)y(s), \quad (\text{II-34})$$

$$\psi = s^{\alpha_{12}}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} P_n^{\left(\alpha_{10} - 1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1\right)}(1 - 2\alpha_3 s). \quad (\text{II-35})$$

Ici, les fonctions alpha sont données par :

$$\alpha_{12} = \alpha_4 + \sqrt{\alpha_8}, \quad (\text{II-36})$$

et

$$\alpha_{13} = \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}). \quad (\text{II-37})$$

Pour quelques problèmes $\alpha_3 = 0$. Pour ces types de problèmes on a :

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} P_n^{\left(\alpha_{10} - 1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1\right)}(1 - 2\alpha_3 s) = L_n^{\alpha_{10} - 1}(\alpha_{11} s), \quad (\text{II-38})$$

et

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} = e^{\alpha_{13} s}. \quad (\text{II-39})$$

La solution donnée dans l'éq. (II-35) devienne

$$\psi = s^{\alpha_{12}} e^{\alpha_{13} s} L_n^{\alpha_{10} - 1}(\alpha_{11} s). \quad (\text{II-40})$$

Dans certains cas, on est besoin d'une deuxième solution de l'éq. (II-15). Dans ce cas, si la même procédure est suivie on utilisant

$$k = -(\alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8) + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9}, \quad (\text{II-41})$$

Cette solution devienne

$$\psi = s^{\alpha_{12}^*} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12}^* - \frac{\alpha_{13}^*}{\alpha_3}} P_n^{\left(\alpha_{10}^* - 1, \frac{\alpha_{11}^*}{\alpha_3} - \alpha_{10}^* - 1\right)}(1 - 2\alpha_3 s), \quad (\text{II-42})$$

est le spectre d'énergie est

$$\alpha_2 n - 2n\alpha_5 + (2n + 1)(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) + n(n - 1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} + \alpha_5 = 0. \quad (\text{II-43})$$

Les paramètres prédéfinis alpha sont les suivants :

$$\alpha_{10}^* = \alpha_1 + 2\alpha_4 - 2\sqrt{\alpha_8}, \quad (\text{II-44})$$

$$\alpha_{11}^* = \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3\sqrt{\alpha_8}), \quad (\text{II-45})$$

$$\alpha_{12}^* = \alpha_4 - \sqrt{\alpha_8}, \quad (\text{II-46})$$

$$\alpha_{13}^* = \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3\sqrt{\alpha_8}). \quad (\text{II-47})$$

2-La méthode d'analyse fonctionnelle de Nikiforov-Uvarov (NUAF)

2.1-Introduction

Dès les premiers jours de la mécanique quantique, la compréhension du spectre d'énergie de toute particule a remonté à la solution de l'équation de Schrödinger [27]. La connaissance de la solution de l'équation de Schrödinger a donnée toutes les informations possibles, en ce qui concerne les propriétés physiques de tout système considéré. Ceux-ci inclure l'énergie, la quantité de mouvement et la coordonnée de la particule dans le système, la fréquence et la longueur d'onde qui décrir le système dans la mécanique quantique, l'amplitude et la phase de probabilité de la fonction d'onde, etc. [28]. La solution de l'équation de Schrödinger a de nombreuses applications dans différents domaines de la physique, notamment physique atomique, physique nucléaire, physique de la condensation et des hautes énergies, physique des particules, physique chimique, etc. [29-46].

Au cours des années, de nombreux chercheurs ont développé différentes méthodes pour obtenir la solution des équations d'onde relativiste et non relativistes contenant des modèles de potentiels centraux et non centraux. L'équation d'onde en question est connue pour être de la forme [47]

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{k_1 - k_2 s}{s(1 - k_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{As^2 + Bs + C}{s^2(1 - k_3 s)^2} \right] \psi(s) = 0, \quad (\text{II-48})$$

avec une transformation de coordonnées appropriée de la forme $s = s(r)$ étant employée. Certaines de ces méthodes développés incluent la mécanique quantique supersymétrique (SUSYQM) [48-54], la méthode de Nikiforov-Uvarov (NU) et sa forme paramétrique [14,55-59], la méthode de factorisation [60-65], la méthode de quantification exacte [66-70], la méthode de quantification propre [29,71-74], l'approche d'analyse fonctionnelle (FAA) [75-77], le formalisme d'intégral de Feynman [78-80], la méthode ansatz [81-84], la méthode d'itération asymptotique [85-91], la méthode des formules [47], etc...

Le but de ce travail est de combiner les méthodes NU, NU paramétrique et FAA pour produire une méthode simple, dépourvue de certaines intégrales compliquées et de manipulations algébriques mathématiques. Aussi pour tester l'efficacité de cette méthode, les solutions de

l'équation de Schrödinger pour quelques modèles potentiels ont été présentées. Les modèles potentiels incluent sont le potentiel de Yukawa, le potentiel de Kratzer filtré, potentiel de Hellmann et le potentiel de Wood–Saxon. Nous avons également montré que leurs spectres d'énergie et leurs fonctions propres correspondent aux résultats de différentes littératures.

2.2-La théorie de la méthode d'analyse fonctionnelle de Nikiforov-Uvarov (NUAF)

En utilisant les concepts de la méthode NU [14], de la méthode NU paramétrique [57] et de la méthode d'analyse fonctionnelle [75], nous avons proposé une méthode simple et élégante pour résoudre une équation différentielle du second ordre de type hypergéométrique appelé la méthode d'analyse fonctionnelle de Nikiforov-Uvarov (NUAF). Cette méthode est facile et simple tout comme la méthode NU paramétrique. Contrairement à la méthode NU qui consistait à rechercher le carré des polynômes et d'autres conditions qui le compliquent, le NUFA peut facilement être utilisé pour obtenir l'énergie et les fonctions d'onde une fois que les équations d'onde sont correctement transformées et les singularités identifiées. Tel quel est bien connue, le NU est utilisé pour résoudre une équation différentielle du second ordre de la forme [59]:

$$\frac{d^2\psi(s)}{ds^2} + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \frac{d\psi(s)}{ds} + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} \psi(s) = 0, \quad (\text{II-49})$$

Où $\sigma(s)$ et $\tilde{\sigma}(s)$ sont des polynômes de degré non supérieur à 2, et $\tilde{\tau}(s)$ est un polynôme d'ordre non supérieur à 1. Dernièrement, Tezcan et Sever [57] ont introduit la forme paramétrique de la méthode NU sous la forme

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1 - \alpha_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{s^2(1 - \alpha_3 s)^2} \right] \psi(s) = 0, \quad (\text{II-50})$$

où α_i et ξ_i ($i = 1, 2, 3$) sont tous des paramètres. On peut observer dans l'éq. (50) que l'équation différentielle a deux singularités à $s \rightarrow 0$ et $s \rightarrow \frac{1}{\alpha_3}$, on prend donc la fonction d'onde sous la forme [17],

$$\psi(s) = s^\lambda (1 - \alpha_3 s)^\nu f(s), \quad (\text{II-51})$$

En remplaçant l'éq.(II-51) dans l'éq.(II-50) on obtient l'équation suivante,

$$s(1 - \alpha_3 s) \frac{d^2 f(s)}{ds^2} + [\alpha_1 + 2\lambda - (2\lambda\alpha_3 + 2\nu\alpha_3 + \alpha_2)s] \frac{df(s)}{ds} + \left\{ -\alpha_3 \left(\lambda + \nu + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right) + \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right)^2 + \frac{\xi_1}{\alpha_3^2}} \right) \left(\lambda + \nu + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right) - \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right)^2 + \frac{\xi_1}{\alpha_3^2}} \right) + \right.$$

$$\left[\frac{\lambda(\lambda-1) + \alpha_1\lambda - \xi_3}{s} + \frac{v(v-1)\alpha_3 + \alpha_2v - \alpha_1\alpha_3v - \frac{\xi_1}{\alpha_3} + \xi_2 - \xi_3\alpha_3}{(1-\alpha_3s)} \right] f(s) = 0. \quad (\text{II-52})$$

L'équation (II-52) peut être réduite à une équation hypergéométrique de Gauss si et seulement si les fonctions suivantes ont disparu,

$$\lambda(\lambda - 1) + \alpha_1\lambda - \xi_3 = 0, \quad (\text{II-53})$$

$$v(v - 1)\alpha_3 + \alpha_2v - \alpha_1\alpha_3v - \frac{\xi_1}{\alpha_3} + \xi_2 - \xi_3\alpha_3 = 0, \quad (\text{II-54})$$

ainsi, l'éq.(II-52) devienne maintenant :

$$s(1 - \alpha_3s) \frac{d^2f(s)}{ds^2} + [\alpha_1 + 2\lambda - (2\lambda\alpha_3 + 2v\alpha_3 + \alpha_2)s] \frac{df(s)}{ds} + \left\{ -\alpha_3 \left(\lambda + v + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right) + \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right)^2 + \frac{\xi_1}{\alpha_3^2}} \right) \left(\lambda + v + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right) - \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right)^2 + \frac{\xi_1}{\alpha_3^2}} \right) \right\} f(s) = 0. \quad (\text{II-55})$$

La résolution des équations. (II-53) et (II-54) donnent complètement,

$$\lambda = \frac{1}{2} \left((1 - \alpha_1) \mp \sqrt{(1 - \alpha_1)^2 + 4\xi_3} \right), \quad (\text{II-56})$$

$$v = \frac{1}{2\alpha_3} \left((\alpha_3 + \alpha_1\alpha_3 - \alpha_2) \mp \sqrt{(\alpha_3 + \alpha_1\alpha_3 - \alpha_2)^2 + 4 \left(\frac{\xi_1}{\alpha_3} + \xi_3\alpha_3 - \xi_2 \right)} \right). \quad (\text{II-57})$$

L'équation (II-55) est le type d'équation hypergéométrique de la forme,

$$x(1 - x) \frac{d^2f(x)}{dx^2} + [c + (a + b + 1)x] \frac{df(x)}{dx} - [ab]f(x) = 0. \quad (\text{II-58})$$

où a, b, c sont donnés comme suit,

$$a = \sqrt{\alpha_3} \left(\lambda + v + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right) + \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right)^2 + \frac{\xi_1}{\alpha_3^2}} \right), \quad (\text{II-59})$$

$$b = \sqrt{\alpha_3} \left(\lambda + v + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right) - \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right)^2 + \frac{\xi_1}{\alpha_3^2}} \right), \quad (\text{II-60})$$

$$c = \alpha_1 + 2\lambda. \quad (\text{II-61})$$

En posant a ou b égal à un entier négatif $-n$, la fonction hypergéométrique $f(s)$ se transforme en un polynôme de degré n . Par conséquent, la fonction hypergéométrique $f(s)$ tend vers le fini pour la condition quantique suivante, c'est-à-dire $a = -n$, où $n = 0, 1, 2, 3, \dots, n_{max}$.

En utilisant la condition quantique ci-dessus,

$$\sqrt{\alpha_3} \left(\lambda + \nu + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right) + \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right)^2 + \frac{\xi_1}{\alpha_3^2}} \right) = -n, \quad (\text{II-62})$$

$$\lambda + \nu + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right) + \frac{n}{\sqrt{\alpha_3}} = -\sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right)^2 + \frac{\xi_1}{\alpha_3^2}}. \quad (\text{II-63})$$

En faisant le carré des deux côtés de l'éq. (II-63) et en réarrangeant, nous obtenons l'équation d'énergie pour la méthode NUFA comme :

$$\lambda^2 + 2\lambda \left(\nu + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right) + \frac{n}{\sqrt{\alpha_3}} \right) + \left(\nu + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right) + \frac{n}{\sqrt{\alpha_3}} \right)^2 - \frac{1}{4} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} - 1 \right)^2 - \frac{\xi_1}{\alpha_3^2} = 0. \quad (\text{II-64})$$

En remplaçant les éqs. (II-56) et (II-57) dans l'équation (II-51), nous obtenons l'équation d'onde correspondante pour la méthode NUFA comme :

$$\psi(s) = C_n s^{\frac{(1-\alpha_1) + \sqrt{(1-\alpha_1)^2 + 4\xi_3}}{2}} (1 - \alpha_3 s)^{\frac{(\alpha_3 + \alpha_1 \alpha_3 - \alpha_2) + \sqrt{(\alpha_3 + \alpha_1 \alpha_3 - \alpha_2)^2 + 4 \left(\frac{\xi_1}{\alpha_3} + \xi_3 \alpha_3 - \xi_2 \right)}}{2\alpha_3}} {}_2F_1(a, b, c; s), \quad (\text{II-65})$$

où C_n est la constante de normalisation.

On étudie maintenant la solution de l'éq. (II-50) pour le cas particulier $\alpha_3 = 0$.

Si $\alpha_3 \rightarrow 0$, la solution de l'éq. (II-50) devienne [92] :

$$\psi(s) = e^{-\delta s} s^\nu f(s). \quad (\text{II-66})$$

En remplaçant l'éq. (II-66) dans l'éq. (II-50) on obtient l'équation suivante :

$$s \frac{d^2 f(s)}{ds^2} + [\alpha_1 + 2\nu - (2\delta + \alpha_2)s] \frac{df(s)}{ds} - (2\delta\nu + \alpha_1\delta + \alpha_2\nu - \xi_2)f(s) + \left[\frac{\nu(\nu-1) + \alpha_1\nu - \xi_3}{s} \right] f(s) + [\delta^2 + \alpha_2\delta - \xi_1]sf(s) = 0. \quad (\text{II-67})$$

L'équation (II-67) peut être réduite à une équation hypergéométrique confluyente si l'on pose $y = (2\mu + \alpha_2)s$ et on obtient

$$y \frac{d^2 f(y)}{dy^2} + [\alpha_1 + 2\nu - y] \frac{df(y)}{dy} - \frac{(2\delta\nu + \alpha_1\delta + \alpha_2\nu - \xi_2)}{2\delta + \alpha_2} f(y) + \left[\frac{\nu(\nu-1) + \alpha_1\nu - \xi_3}{y} \right] f(y) + \left[\frac{\delta^2 + \alpha_2\delta - \xi_1}{(2\delta + \alpha_2)^2} \right] yf(y) = 0. \quad (\text{II-68})$$

L'équation (II-68) devienne une fonction hypergéométrique confluyente, si et seulement si les deux derniers termes de $\frac{1}{y}$ et y ont disparus. C'est-à-dire,

$$v(v-1) + \alpha_1 v - \xi_3 = 0, \quad (\text{II-69})$$

$$\left[\frac{\delta^2 + \alpha_2 \delta - \xi_1}{(2\delta + \alpha_2)^2} \right] = 0. \quad (\text{II-70})$$

Par conséquent, l'éq. (II-68) peut maintenant s'écrire

$$y \frac{d^2 f(y)}{dy^2} + [\alpha_1 + 2v - y] \frac{df(y)}{dy} - \frac{(2\delta v + \alpha_1 \delta + \alpha_2 v - \xi_2)}{2\delta + \alpha_2} f(y) = 0. \quad (\text{II-71})$$

Les valeurs de δ et v peuvent être obtenues explicitement en résolvant les équations. (II-69) et (II-70) comme

$$\delta = \frac{-\alpha_2 \mp \sqrt{\alpha_2^2 + 4\xi_1}}{2}, \quad (\text{II-72})$$

$$v = \frac{-(\alpha_1 - 1) \mp \sqrt{(\alpha_1 - 1)^2 + 4\xi_3}}{2}. \quad (\text{II-73})$$

L'équation (II-68) est le type d'équation hypergéométrique confluente de la forme [16],

$$x \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + [c - x] \frac{df(x)}{dx} - af(x) = 0, \quad (\text{II-74})$$

qui a une singularité régulière en $x = 0$ et une singularité irrégulière en $x = \infty$. Les valeurs propres d'énergie sont définies à partir de l'éq. (II-71) comme $\frac{(2\delta v + \alpha_1 \delta + \alpha_2 v - \xi_2)}{2\delta + \alpha_2} = -n$ qui peut être exprimée explicitement comme

$$(2\delta v + \alpha_1 \delta + \alpha_2 v - \xi_2) + n(2\delta + \alpha_2) = 0. \quad (\text{II-75})$$

La fonction d'onde correspondante est donnée par [92]

$$f(y) = {}_1F_1(a; c; y) = 1 + \frac{a}{c} \frac{y}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{y^2}{2!} + \dots \quad (\text{II-76})$$

Ainsi, la fonction d'onde totale s'écrit

$$\psi(s) = Ne^{-\delta s} s^v {}_1F_1(-n, (\alpha_1 + 2v); (\alpha_2 + 2\delta)s). \quad (\text{II-77})$$

Avec les éqs. (72), (73), (75) et (76), on peut déterminer les spectres d'énergie et les fonctions d'onde pour tout potentiel central. Cette analyse est la nouvelle version de la méthode NUFA pour résoudre les équations de Schrödinger, Klein-Gordon et Dirac avec potentiels centraux.

3-Quelques applications

L'équation de Schrödinger tridimensionnelle indépendante du temps en présence de tout modèle de potentiel physique est donnée par

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} + V(r) - E_{nl}\right)\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = 0, \quad (\text{II-78})$$

où μ est la masse réduite, E_{nl} est l'énergie non relativiste du système, $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ est la fonction d'onde et $V(r)$ est le potentiel d'interaction. Posant les fonctions d'onde $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = U_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)r^{-1}$; nous avons l'équation de Schrödinger radiale comme

$$\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right)U_{nl}(r) = 0. \quad (\text{II-79})$$

On applique ceux-ci sur quatre modèles de potentiels différents.

3.1-Le potentiel de Yukawa

Le potentiel de Yukawa a été proposé par Yukawa en 1935 [93] comme un potentiel non relativiste efficace décrivant les interactions fortes entre nucléons. Il prend la forme suivante :

$$V(r) = -\frac{V_0}{r}e^{-\delta r}, \quad (\text{II-80})$$

et peut donc être considéré comme une version filtrée du potentiel de Coulomb, avec V_0 décrivant l'interaction forte et $1/\delta$ sa portée. Le même potentiel apparaît sous le nom de potentiel de Debye–Hückel en physique des plasmas, où il représente le potentiel d'une particule chargée dans un plasma non idéal [94], ainsi que dans les électrolytes et les colloïdes.

En physique du solide, c'est connu comme le potentiel de Thomas-Fermi, et décrit les effets d'une particule chargée dans une mer de conduction des électrons.

En mécanique quantique, la physique de ce potentiel dépend fortement de la valeur de la paramètre de dépistage δ . Alors que pour le cas de Coulomb $\delta = 0$ il existe une infinité d'états liés, et pour δ supérieur à une certaine valeur critique δ_c , les états liés cessent complètement d'exister. La valeur critique [94] est proportionnelle à δm : $\delta_c \approx 1.19\delta m$. Malgré sa proximité superficielle avec le potentiel de Coulomb, celui de Yukawa ne partage guère les propriétés mathématiques exceptionnelles du premier. A ce jour, pour $\delta \neq 0$ ni les valeurs propres de l'énergie, ni les fonctions propres, ni le paramètres de dépistage critique ne sont connus sous forme fermée. Cette combinaison d'importance physique et de traitement mathématique rend le potentiel de Yukawa un cas de test naturel pour les méthodes d'approximation en mécanique quantique.

L'équation radiale de Schrödinger avec le potentiel de Yukawa est donnée par :

$$\frac{d^2 U_{n\ell}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E_{n\ell} + \frac{V_0 e^{-\delta r}}{r} - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} \right] U_{n\ell}(r) = 0. \quad (\text{II-81})$$

Cette équation ne peut pas être résolue analytiquement pour $\ell \neq 0$ en raison du terme centrifuge. Employant le schéma d'approximation de Greene Aldrich de la forme [95]:

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{\delta^2}{(1 - e^{-\delta r})^2}; \quad \frac{1}{r} \approx \frac{\delta}{(1 - e^{-\delta r})}, \quad (\text{II-82})$$

et une transformation de coordonnée $z = e^{-\delta r}$, l'éq. (II-81) se réduit à l'équation différentielle suivante :

$$\frac{d^2 U_{n\ell}(z)}{dz^2} + \frac{(1-z)}{z(1-z)} \frac{dU_{n\ell}(z)}{dz} + \frac{1}{z^2(1-z)^2} [-(\varepsilon_{n\ell} + P)z^2 + (2\varepsilon_{n\ell} + P)z - (\varepsilon_{n\ell} + \gamma)] U_{n\ell}(z) = 0, \quad (\text{II-83})$$

où

$$-\varepsilon_{n\ell} = \frac{2\mu E_{n\ell}}{\hbar^2 \delta^2}; \quad P = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 \delta}; \quad \gamma = \ell(\ell + 1). \quad (\text{II-84})$$

En comparant l'éq. (II-83) avec l'équation NUFA (II-50), on obtient ce qui suit :

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 1, \quad \xi_1 = \varepsilon_{n\ell} + P, \quad \xi_2 = 2\varepsilon_{n\ell} + P, \quad \xi_3 = \varepsilon_{n\ell} + \gamma, \quad \lambda = \sqrt{\varepsilon_{n\ell} + \gamma}, \quad \sigma = (\ell + 1). \quad (\text{II-85})$$

L'équation d'énergie peut également être obtenue comme :

$$\varepsilon_{n\ell} + \gamma + 2\sqrt{\varepsilon_{n\ell} + \gamma}(n + \sigma) + (n + \sigma)^2 - (\varepsilon_{n\ell} + P) = 0. \quad (\text{II-86})$$

Substitution les éqs. (II-84) et (II-85) dans l'équation (II-86), on obtient :

$$E_{n\ell} = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2 \delta^2}{2\mu} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2} - \ell(\ell+1)\delta - (n+\ell+1)^2 \delta}{2(n+\ell+1)} \right]^2. \quad (\text{II-87})$$

L'équation. (II-87) est similaire à l'équation d'énergie pour le modèle de potentiel de Yukawa obtenu dans le réf. [96]. Sa fonction d'onde correspondante peut être obtenue comme étant :

$$U_{n\ell}(z) = \mathbb{N}_{n\ell} z^{\left(\sqrt{-\frac{2\mu E_{n\ell}}{\hbar^2 \delta^2} + \ell(\ell+1)}\right)} (1-z)^{(\ell+1)} {}_2F_1(a, b, c; z). \quad (\text{II-88})$$

Ici, les paramètres sont définis comme

$$a = \lambda + \sigma + \sqrt{\varepsilon_{n\ell} + p} , \quad (\text{II-89})$$

$$b = \lambda + \sigma - \sqrt{\varepsilon_{n\ell} + p} , \quad (\text{II-90})$$

$$c = 1 + 2\lambda , \quad (\text{II-91})$$

et $N_{n\ell}$ est la constante de normalisation.

3.2-Le potentiel de Kratzer filtré

Le potentiel de Kratzer filtré a été proposé récemment par Ikot et al. [97]. L'expression de ce potentiel est indiquée comme suit [97]:

$$V(r) = -2D_e \left(\frac{A}{r} - \frac{B}{2r^2} \right) e^{-\delta r}, \quad A = r_e, B = r_e^2, \quad (\text{II-92})$$

où D_e est l'énergie de dissociation, r_e est la longueur de la liaison à l'équilibre, r est la distance interatomique et δ est le paramètre de dépistage.

Ce potentiel est un cas général de nombreux potentiels, il se réduit au "potentiel de Kratzer" lorsque δ tend vers zéro, Potentiel « Yukawa » (c'est-à-dire « Coulomb filtré ») lorsque $B = 0$, et le potentiel « Coulomb » lorsque $B = 0$ et $\delta \rightarrow 0$. Plus encore, si $A = 0$, le potentiel se rétrécit à un potentiel inverse quadratique de Yukawa .

En remplaçant l'éq. (II-92) dans l'équation radiale de Schrödinger, on obtient :

$$\frac{d^2 U_{n\ell}(r)}{dr^2} + \left[\frac{2\mu E_{n\ell}}{\hbar^2} + \frac{2\mu D_e}{\hbar^2} \left(\frac{A}{r} - \frac{B}{2r^2} \right) e^{-\delta r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U_{n\ell}(r) = 0. \quad (\text{II-93})$$

En utilisant le schéma d'approximation donné dans l'équation. (II-82) et la transformation des coordonnées de la forme $z = e^{-\delta r}$, l'éq.(II-93) se réduit à l'équation différentielle suivante :

$$\frac{d^2 U_{n\ell}(z)}{dz^2} + \frac{(1-z)}{z(1-z)} \frac{dU_{n\ell}(z)}{dz} + \frac{1}{z^2(1-z)^2} [-(\varepsilon_{n\ell} + P_1)z^2 + (2\varepsilon_{n\ell} + P_1 + Q_1)z - (\varepsilon_{n\ell} + \gamma)] U_{n\ell}(z) = 0. \quad (\text{II-94})$$

Ici, nous avons défini les paramètres suivants :

$$-\varepsilon_{n\ell} = \frac{2\mu E_{n\ell}}{\hbar^2 \delta^2}, P_1 = \frac{4\mu D_e A}{\hbar^2 \delta}, Q_1 = -\frac{2\mu D_e B}{\hbar^2}, \gamma = \ell(\ell + 1). \quad (\text{II-95})$$

En comparant l'éq. (II-94) avec l'équation NUFA (II-50), on obtient ce qui suit :

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 1, \xi_1 = \varepsilon_{n\ell} + P_1, \xi_2 = 2\varepsilon_{n\ell} + P_1 + Q_1, \xi_3 = \varepsilon_{n\ell} + \gamma; \lambda = \sqrt{\varepsilon_{n\ell} + \gamma}, \sigma = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{(2\ell + 1)^2 + \frac{8\mu D_e B}{\hbar^2}} \right). \quad (\text{II-96})$$

L'équation d'énergie se déduit comme :

$$\varepsilon_{n\ell} + \gamma + 2\sqrt{\varepsilon_{n\ell} + \gamma}(n + \sigma) + (n + \sigma)^2 - (\varepsilon_{n\ell} + P_1) = 0. \quad (\text{II-97})$$

Substitution les éqs. (II-95) et (II-96) dans l'équation (II-97) et en réarrangeant, on obtient :

$$E_{n\ell} = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2\delta^2}{2\mu} - \frac{\hbar^2\delta^2}{2\mu} \left[\frac{\left(\frac{4\mu D_e A}{\hbar^2\delta} - \ell(\ell+1)\right)}{2(n+\sigma)} - \frac{(n+\sigma)}{2} \right]^2. \quad (\text{II-98})$$

L'équation (98) est équivalente à l'équation d'énergie pour le modèle de potentiel de Kratzer filtré, comme celle obtenue dans le ref. [98].

La fonction propre correspondante est obtenue comme :

$$U_{n\ell}(z) = \mathbb{N}_{n\ell} z^{\left(\sqrt{-\frac{2\mu E_{n\ell}}{\hbar^2\delta^2} + \ell(\ell+1)}\right)} (1-z)^{\left(\frac{1}{2}\left(1 + \sqrt{(2\ell+1)^2 + \frac{8\mu D_e B}{\hbar^2}}\right)\right)} {}_2F_1(a_1, b_1, c_1; z), \quad (\text{II-99})$$

où

$$a_1 = \lambda + \sigma + \sqrt{\varepsilon_{n\ell} + p_1}, \quad (\text{II-100})$$

$$b_1 = \lambda + \sigma - \sqrt{\varepsilon_{n\ell} + p_1}, \quad (\text{II-101})$$

$$c_1 = 1 + 2\lambda, \quad (\text{II-102})$$

et $\mathbb{N}_{n\ell}$ est la constante de normalisation.

3.3-Le potentiel de Hellman

Le potentiel de Hellmann est la superposition du potentiel de Coulomb et le potentiel de Yukawa, il est défini comme suit [99]:

$$V(r) = -\frac{G}{r} + \frac{H}{r} e^{-\delta r}, \quad (\text{II-103})$$

où G et H représentent les forces du potentiel de Coulomb et du potentiel de Yukawa et δ est le paramètre de dépistage. G , δ sont positifs et H peut être à la fois positif et négatif.

Historiquement, ce potentiel a été proposé par Hellmann [99]. Cela a trouvé divers importants

applications dans le domaine de la physique atomique et de la matière condensée ; par exemple, le noyau électronique, électron-ion, problèmes d'ionisation de la couche interne, molécules d'hydrure alcalin, état solide physique, etc.

L'équation radiale de Schrödinger avec le potentiel de Hellmann est donnée par :

$$\frac{d^2 U_{n\ell}(r)}{dr^2} + \left[\frac{2\mu E_{n\ell}}{\hbar^2} + \frac{G}{r} - \frac{H}{r} e^{-\delta r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U_{n\ell}(r) = 0. \quad (\text{II-104})$$

En utilisant le schéma d'approximation donné dans l'équation. (II-82) et la transformation des coordonnées de la forme $z = e^{-\delta r}$ pour résoudre l'éq. (II-104), l'équation différentielle de la forme suivante est obtenue :

$$\frac{d^2 U_{n\ell}(z)}{dz^2} + \frac{(1-z)}{z(1-z)} \frac{dU_{n\ell}(z)}{dz} + \frac{1}{z^2(1-z)^2} [-(\varepsilon_{n\ell} - Q_2)z^2 + (2\varepsilon_{n\ell} - P_2 - Q_2)z - (\varepsilon_{n\ell} - P_2 + \gamma)] U_{n\ell}(z) = 0, \quad (\text{II-105})$$

et

$$-\varepsilon_{n\ell} = \frac{2\mu E_{n\ell}}{\hbar^2 \delta^2}, P_2 = \frac{2\mu G}{\hbar^2 \delta}, Q_2 = \frac{2\mu H}{\hbar^2 \delta}, \gamma = \ell(\ell+1). \quad (\text{II-106})$$

Comparant l'éq. (II-105) avec l'équation NUFA (II-50), on obtient les expressions suivantes :

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 1, \xi_1 = \varepsilon_{n\ell} - Q_2, \xi_2 = 2\varepsilon_{n\ell} - P_2 - Q_2, \xi_3 = \varepsilon_{n\ell} - P_2 + \gamma, \lambda = \sqrt{\varepsilon_{n\ell} - P_2 + \gamma}, \sigma = (\ell+1), \quad (\text{II-107})$$

ainsi

$$\varepsilon_{n\ell} - P_2 + \gamma + 2\sqrt{\varepsilon_{n\ell} - P_2 + \gamma}(n + \sigma) + (n + \sigma)^2 - (\varepsilon_{n\ell} - Q_2) = 0, \quad (\text{II-108})$$

Substitution les éqs. (II-106) et (II-107) dans l'équation (II-108) et en réarrangeant, on obtient les valeurs propres d'énergie comme :

$$E_{n\ell} = \left(\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2 \delta}{2\mu} - G \right) \delta - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\frac{2\mu}{\hbar^2}(G-H) - \ell(\ell+1)\delta - (n+\ell+1)^2 \delta}{2(n+\ell+1)} \right]^2. \quad (\text{II-109})$$

L'équation (II-109) est équivalente à l'équation d'énergie pour le potentiel de Hellmann obtenue dans le ref. [96].

La fonction propre correspondante du Hellmann peut être obtenue comme étant :

$$U_{n\ell}(z) = N_{n\ell} z^{\left(\sqrt{-\frac{2\mu E_{n\ell}}{\hbar^2 \delta^2} - \frac{2\mu G}{\hbar^2 \delta} + \ell(\ell+1)} \right)} (1-z)^{(\ell+1)} {}_2F_1(a_2, b_2, c_2; z), \quad (\text{II-110})$$

où

$$a_2 = \lambda + \sigma + \sqrt{\varepsilon_{n\ell} - Q_2}, \quad (\text{II-111})$$

$$b_2 = \lambda + \sigma - \sqrt{\varepsilon_{n\ell} - Q_2}, \quad (\text{II-112})$$

$$c_2 = 1 + 2\lambda, \quad (\text{II-113})$$

et $N_{n\ell}$ est la constante de normalisation.

3.4-Le potentiel de Woods-Saxon déformé

Le potentiel de Woods-Saxon est un potentiel de champ moyen pour les nucléons (protons et neutrons) à l'intérieur du noyau atomique. Il est utilisé pour décrire de manière approximative les forces qui s'appliquent entre les nucléons.

Le potentiel a été proposé en 1954 par R. D. Woods et David S. Saxon afin de décrire la diffusion des protons sur les noyaux lourds, tels que le platine ou le nickel [100]. Dans leur article, ils introduisent ce potentiel, en remplacement d'un puits de potentiel carré, afin d'obtenir une meilleure reproduction des sections efficaces différentielles de la diffusion élastique. Ce nouveau potentiel permet d'obtenir des résultats plus cohérents à ceux obtenus en considérant une diffusion Rutherford.

Le potentiel de Woods-Saxon déformé prend la forme suivante :

$$V(r) = -\frac{V_0}{1+qe^{\left(\frac{r-L}{a}\right)}}, \quad L = r_0 A_0^{1/3}, \quad (\text{II-114})$$

où $V_0 = (40.5 + 0.13A_0)MeV$, $L \gg a$, $q > 0$. Ici, V_0 est la profondeur du potentiel, q est le paramètre de déformation, qui détermine la forme du potentiel, a représente la diffusivité de la surface nucléaire, L est la largeur du potentiel, A_0 est le numéro de masse atomique du noyau cible et r_0 représente le paramètre de rayon.

L'équation radiale de Schrödinger avec le potentiel déformé de Woods – Saxon peut s'écrire :

$$\frac{d^2 U_{n\ell}(r)}{dr^2} + \left[\frac{2\mu E_{n\ell}}{\hbar^2} + \frac{V_0}{1+qe^{\left(\frac{r-L}{a}\right)}} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U_{n\ell}(r) = 0. \quad (\text{II-115})$$

La barrière centrifuge dans l'éq.(II-115) est approché avec le schéma d'approximation de Pekeris [101] donné au-dessous :

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{\ell(\ell+1)}{L^2} \left(D_0 - \frac{D_1}{q+e^{vx}} + \frac{D_2}{(q+e^{-vx})^2} \right); \quad v = \frac{1}{a}; \quad x = r - L, \quad (\text{II-116})$$

où

$$D_0 = 1 - \left(\frac{1+e^{-aL}}{aL} \right)^2 + \left(\frac{4aL}{1+e^{-aL}} - 3 - aL \right), \quad (\text{II-117})$$

$$D_1 = 2(e^{aL} + 1) \left(\frac{3(1+e^{-aL})}{aL} - (3 + aL) \frac{(1+e^{-aL})}{aL} \right), \quad (\text{II-118})$$

$$D_2 = (e^{aL} + 1)^2 \left(\frac{1+e^{-aL}}{aL} \right)^2 \left(3 + aL - \frac{2aL}{1+e^{-aL}} \right), \quad (\text{II-119})$$

En utilisant l'approximation de Pekeris de l'équation. (II-116) et employant une transformation de coordonnées de la forme $z = e^{vx}$, l'éq. (II-115) se réduit à une équation différentielle de la forme :

$$\frac{d^2 U_{n\ell}(z)}{dz^2} + \frac{(1+qz)}{z(1+qz)} \frac{dU_{n\ell}(z)}{dz} + \frac{1}{z^2(1+qz)^2} [-X_1 z^2 + X_2 z - X_3] U_{n\ell}(z) = 0, \quad (\text{II-120})$$

où

$$X_1 = \frac{1}{v^2} \left(\varepsilon_{n\ell} q^2 - \frac{2\mu q V_0}{\hbar^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{L^2} (q^2 D_0 - q D_1 + D_2) \right), \quad (\text{II-121})$$

$$X_2 = \frac{1}{v^2} \left(-2q \varepsilon_{n\ell} + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{L^2} (2q D_0 - D_1) \right), \quad (\text{II-122})$$

$$X_3 = \varepsilon_{n\ell} + \frac{\ell(\ell+1) D_0}{L^2}. \quad (\text{II-123})$$

Comparant l'éq. (II-120) avec l'équation NUFA (II-50) et en utilisant une fonction d'onde d'essai de la forme $U_{n\ell}(Z) = Z^\lambda (1 + qZ)^\sigma f_{n\ell}(Z)$, on obtient les expressions suivantes :

$$\alpha_1 = 1, \alpha_2 = \alpha_3 = -q, \xi_1 = X_1, \xi_2 = X_2, \xi_3 = X_3, \lambda = \sqrt{X_3}, \sigma = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - 4 \left(\frac{X_1}{q^2} - \frac{X_2}{q} + X_3 \right)} \right). \quad (\text{II-124})$$

L'équation d'énergie et l'équation d'onde correspondante peuvent être obtenues respectivement comme :

$$X_3 + 2\sqrt{X_3} \left(\sigma + \frac{n}{\sqrt{-q}} \right) + \left(\sigma + \frac{n}{\sqrt{-q}} \right)^2 - \frac{X_1}{q} = 0, \quad (\text{II-125})$$

$$U_{n\ell}(z) = \mathbb{N}_{n\ell} z^{\sqrt{X_3}} (1 + qz)^{\left(\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - 4 \left(\frac{X_1}{q^2} - \frac{X_2}{q} + X_3\right)}\right)\right)} {}_2F_1(a_3, b_3, c_3; z), \quad (\text{II-126})$$

où

$$a_3 = \sqrt{q} \left(\lambda + \sigma + \sqrt{-\frac{X_1}{q^2}} \right), \quad (\text{II-127})$$

$$b_3 = \sqrt{q} \left(\lambda + \sigma - \sqrt{-\frac{X_1}{q^2}} \right), \quad (\text{II-128})$$

$$c_3 = 1 + 2\lambda. \quad (\text{II-129})$$

Chapitre III

Solution de l'équation de

Schrödinger

pour le potentiel de Morse

généralisé

Solutions de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse généralisé

1-Introduction

Dans le présent travail, nous considérerons spécifiquement le potentiel de Morse généralisé, qui est un potentiel merveilleux, car il peut donner un nombre fini des états liés contrairement au potentiel de Coulomb ou d'oscillateur harmonique et donc à la conception du contrôle de la limite d'un régime fini. En même temps, le potentiel de Morse est une bonne approximation aux modes vibrationnels observés expérimentalement dans les molécules diatomiques [102].

2-Le potentiel de Morse généralisé

Le potentiel de Morse, du au nom du physicien américain Philip M. Morse [102], est un modèle pratique de l'énergie potentielle d'une molécule diatomique. C'est une meilleure approximation pour décrire la structure vibrationnelle des molécules que l'oscillateur harmonique quantique car il inclut clairement les effets de la rupture des liaisons chimiques et des existences non corrélées. Il explique également l'anharmonicité des liaisons réelles et la probabilité non nulle de transition pour les états harmoniques et les bandes de combinaison. Il peut être aussi utilisé pour modélisation des interactions entre l'atome et sa surface.

Dans cette étude, le potentiel de Morse généralisé est proposé d'être [92]

$$V(r) = V_0(1 - e^{-a(r-r_0)})^2 + V_1(q - e^{-a(r-r_0)})^2, \quad (\text{III-1})$$

où V_0 et V_1 décrivent les profondeurs du potentiel de Morse généralisé, r_0 représente la longueur de la liaison d'équilibre ou la distance à laquelle le potentiel de Morse est égal à zéro, a représente la gamme du potentiel de Morse généralisé, et q est le paramètre de déformation, ($q > 0$).

3-Solutions de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse généralisé

On va essayer de trouver le spectre d'énergie et les fonctions d'onde de l'équation de Schrödinger pour le potentiel de Morse généralisé via la nouvelle version de la méthode NUFA.

L'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques est définie comme

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

avec L : est l'opérateur du moment angulaire orbital qui est définie comme

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \quad (\text{III-3})$$

et m est la masse réduite des particules, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ est la constante de Planck réduite, E est le niveau d'énergie du système, $V(r)$ est le potentiel d'interaction, et $\psi(r, \theta, \varphi)$ est la fonction d'onde correspondante. La symétrie sphérique de l'éq. (3-2) nous permet d'écrire la fonction d'onde comme

$$\psi_{nl}(r, \theta, \varphi) = \frac{R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)}{r}, \quad (\text{III-4})$$

où $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ est les harmoniques sphériques qui est défini comme

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta), \quad (\text{III-5})$$

où l est le nombre quantique du moment angulaire et m est le nombre quantique magnétique, et $P_l^m(\cos\theta)$ est le polynôme de Legendre associé.

L'équation radiale pour le potentiel de Morse généralisé s'écrit

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - V_0(1 - e^{-a(r-r_0)})^2 - V_1(q - e^{-a(r-r_0)})^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) R_{nl}(r) = 0 \quad (\text{III-6})$$

Soit maintenant $x = \frac{r-r_0}{r_0}$ et $\alpha = r_0 a$, avec les abréviations suivantes :

$$\varepsilon = \frac{2\mu r_0^2}{\hbar^2} E \quad (\text{III-7})$$

$$\beta = \frac{2\mu r_0^2}{\hbar^2} V_0 \quad (\text{III-8})$$

$$\gamma = \frac{2\mu r_0^2}{\hbar^2} V_1 \quad (\text{III-9})$$

l'équation (6) devienne

$$\frac{d^2 R_{nl}(x)}{dx^2} + \left(\varepsilon - \beta(1 - e^{-\alpha x})^2 - \gamma(q - e^{-\alpha x})^2 - \frac{l(l+1)r_0^2}{r^2} \right) R_{nl}(x) = 0, \quad (\text{III-10})$$

Il est bien connu que l'éq. (10) ne peut pas être résolu exactement à cause du terme de barrière centrifuge $\frac{l(l+1)r_0^2}{r^2}$. Afin de trouver la solution pour cette difficulté, un schéma d'approximation de Pekeris [92] est utilisé pour surmonter le terme centrifuge. Pekeris [92] a exprimé le terme de la force centrifuge autour de $x = 0$ comme

$$\frac{l(l+1)r_0^2}{r^2} = \frac{l(l+1)}{(x+1)^2} \approx l(l+1)(1 - 2x + 3x^2 + O(x^3)) \quad (\text{III-11})$$

Par la suite, le terme centrifuge peut également être exprimé en termes d'exponentielle jusqu'au second ordre comme suit :

$$\frac{l(l+1)r_0^2}{r^2} \approx l(l+1)(A_0 + A_1 e^{-\alpha x} + A_2 e^{-2\alpha x}). \quad (\text{III-12})$$

En développant maintenant les termes exponentiels dans l'équation. (III-12) jusqu'au second ordre et en comparant avec l'éq. (III-11), les expressions des coefficients A_0 , A_1 et A_2 deviennent

$$A_0 = 1 - \frac{3}{\alpha} + \frac{3}{\alpha^2}, A_1 = \frac{4}{\alpha} - \frac{6}{\alpha^2}, A_2 = -\frac{1}{\alpha} + \frac{3}{\alpha^2} \quad (\text{III-13})$$

Par substitution l'éq. (III-12) dans l'éq. (III-10) avec une nouvelle transformation de coordonnées, $z = e^{-\alpha x}$, l'équation radiale de Schrödinger avec le potentiel de Morse généralisé devient

$$\frac{d^2 R_{nl}(z)}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dR_{nl}(z)}{dz} + \frac{1}{z^2} \left[-\left(\frac{\beta + \gamma + l(l+1)A_2}{\alpha^2} \right) z^2 + \left(\frac{2\beta - 2q\gamma - l(l+1)A_1}{\alpha^2} \right) z - \left(\frac{\beta + q^2\gamma + l(l+1)A_0 - \varepsilon}{\alpha^2} \right) \right] R_{nl}(z) = 0 \quad (\text{III-14})$$

L'équation (III-14) peut maintenant être résolue avec la nouvelle version de la méthode NUFA. Comparant l'éq. (III-14) avec l'éq. (II-50), on obtient les valeurs des paramètres comme suit:

$$\alpha_1 = 1, \alpha_2 = \alpha_3 = 0, \xi_1 = \frac{\beta + \gamma + l(l+1)A_2}{\alpha^2}, \xi_2 = \frac{2\beta - 2q\gamma - l(l+1)A_1}{\alpha^2}, \xi_3 = \frac{\beta + q^2\gamma + l(l+1)A_0 - \varepsilon}{\alpha^2}. \quad (\text{III-15})$$

Avec les éqs. (II-72) et (II-73), δ et ν peut être obtenu comme suit :

$$\delta = \frac{1}{\alpha} \sqrt{\beta + \gamma + l(l+1)A_2}; \quad \nu = \mp \frac{1}{\alpha} \sqrt{\beta + q^2\gamma + l(l+1)A_0 - \varepsilon} \quad (\text{III-16})$$

Pour trouver les valeurs propres d'énergie, on utilise l'équation (II-75) suivante :

$$(2\delta\nu + \alpha_1\delta + \alpha_2\nu - \xi_2) + n(2\delta + \alpha_2) = 0, \quad (\text{III-17})$$

après quelque réarrangements, on trouve

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \left\{ \left[\frac{2\mu r_0^2}{\hbar^2} (V_0 + q^2 V_1) + l(l+1) \left(1 - \frac{1}{\alpha} + \frac{3}{\alpha^2} \right) \right] - \alpha^2 \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\frac{2\mu r_0^2}{\hbar^2} (V_0 + 2qV_1) - l(l+1) \left(\frac{2}{\alpha} - \frac{3}{\alpha^2} \right)}{\alpha \sqrt{\frac{2\mu r_0^2}{\hbar^2} (V_0 + V_1) + l(l+1) \left(\frac{3}{\alpha^2} - \frac{1}{\alpha} \right)}} \right]^2 \right\}, n = 0, 1, \dots \quad (\text{III-18})$$

Les valeurs propres d'énergie et les fonctions d'onde correspondante sont maintenant obtenues en utilisant l'éq. (II-77) comme

$$R_{nl}(z) = C_n e^{-\delta z} z^\nu {}_1F_1(-n, (1+2\nu); z) \quad (\text{III-19})$$

où C_n est la constante de normalisation. La fonction hypergéométrique confluyente dans l'éq. (III-19) peut être écrite en termes de polynôme de Laguerre dont la propriété est définie comme

$${}_1F_1(-n, (1+2\nu), s) = \frac{n\Gamma(n+p+1)}{\Gamma(p+1)} L_n^p(s), \quad (\text{III-20})$$

où $L_n^p(s)$ est le polynôme de Laguerre. Avec l'éq. (III-20), la fonction d'onde dans l'é. (III-19) devient

$$R_{nl}(z) = C_n e^{-\delta z} z^\nu L_n^{2\nu}(2\mu z) \quad (\text{III-21})$$

La constante de normalisation C_n se calcule à partir de la condition suivante :

$$\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 dr = 1, \quad (\text{III-22})$$

après quelques transformations et calculs , on trouve

$$C_n = \sqrt{\frac{(2\delta)^\alpha}{r_0 \int_0^{2\delta} e^{-y} y^{\alpha-1} |L_n^\alpha(y)|^2 dy}}. \quad (\text{III-23})$$

avec $\alpha = 2\nu$.

Conclusion

Conclusion

Dans ce travail de mémoire de master, nous avons trouvé les solutions approximatives de l'équation de Schrödinger stationnaire pour le potentiel de Morse généralisé en utilisant la méthode NUFA récemment proposée.

Cette nouvelle méthode qui a été proposée pour résoudre l'équation de Schrödinger s'appelle la méthode d'analyse fonctionnelle (NUFA). Elle est conçue à partir de la méthode NU, de la méthode NU paramétrique et la méthode d'analyse fonctionnelle. Elle est simple et élégante pour résoudre une équation différentielle du second ordre de type hypergéométrique. Elle est facile et simple tout comme la méthode NU paramétrique. Contrairement à la méthode NU qui consistait à rechercher le carré des polynômes et d'autres conditions qui le compliquent, la méthode NUFA est très facile à utiliser pour obtenir l'énergie et la fonction d'onde une fois les équations d'onde correctement transformées et les singularités identifiées. Cette méthode peut être utilisée pour résoudre quelques problèmes en physique nucléaire, en physique des particules, ainsi qu'en physique moléculaire.

Références bibliographiques

Références bibliographiques

- [1] E. Schrödinger, "The non relativistic equation of the de Broglie waves," Ann. Physik 79(1926)361-376.

- [2] C.L. Tang, Fundamentals of Quantum Mechanics: For Solid State Electronics and Optics (Cambridge University Press.

- [3] M. Hamzavi, S.M. Ikhdaïr, K.E. Thylwe, J. Math. Chem. **51**, 227 (2013).

- [4] H. M. Tang, G. C. Liang, L. H. Zhang, F. Zhao, and C. S. Jia. *Can. J. Chem.* 92 (2014) 201.
- [5] W C Qiang, K Li and W L Chen, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42** (2009) 205306.
- [6] Falaye, B. J., Oyewumi, K. J., Abbas, M., *Chinese Physics B* 22 (11) (2013) 110301.
- [7] Chen, G., *Physics Letters A* 326 (1-2) (2004) 55-57.
- [8] Onate, C. A., Ojonubah, J. O., *Journal of Theoretical and Applied Physics* 10 (1) (2016) 21-26.
- [9] Diaf A., Chouchaoui A. and Lombard R.L., 2005. *Ann. Phys.*, 317, 354.
- [10] Oyewumi K.J., 2010. *Int. J. Theor. Phys.*, 49, 1302.
- [11] Jia, C.-S., Jia, Y., *The European Physical Journal D* 71 (1) (2017) 3.
- [12] Deng, Fan, Y.P. Shandov, *Univ. J.* 7 (1957) 162.
- [13] A.D. Mesa, C. Quesne, Y.J. Smirnov, *Phys. A: Math. Gen.* 31,1 (1998) 321.
- [14] A.F. Nikiforov, V.B. Uvarov, A. Jaffe, *Special Functions of Mathematical Physics* (Birkhauser, Basel,1988).
- [15] C. Tezcan, R. Sever, *Int. J. Theor. Phys.* **48**, 337 (2009).
- [16] M. Abramowitz, I.A.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (Dover, New York, 1972).
- [17] A. N. Ikot · U. S. Okorie · P. O. Amadi · C. O. Edet ·G. J. Rampho · R. Sever, *Few-Body Syst* (2021) 62:9 .
- [18] S.Medjber, Thèse de Doctorat, (Universié de sétif 2017).
- [19]L. Landau et E. Lifchitz, *mécanique quantique*, edition mir 1975.
- [20]M. Born, *The Statistical Interpretation of Quantum Mechanics nobel Lecture*, December 11, 1954.
- [21]C.C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloe-*Mecanique Quantique-T1 et T2-* Hermann, Paris, novella edition revue, corrigée et augmentée 1977.
- [22]L. Krache, Thèse de Doctorat, (Université de Sétif, 2010).
- [23]H.Boucheriha.'Introduction à la physique quantique'. Centre de publication universitaire : Tunis.(2002).
- [24]A. Messiah, *Mécanique Quantique T1* (Dunod,Paris,1995) nouvelle édition.
- [25]C.C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloe-*Mécanique Quantique-T1 et T2-* Hermann, Paris, novella edition revue, corrigée et augmentée 1977.

- [26]L. Gendenshtein, I.V. Krive, Supersymmetry in quantum mechanics, *Sov.Phys.Usp.* **28**, 654 (1985).
- [27]S. Flugge, *Practical Quantum Mechanics II* (Springer, Berlin, 1971).
- [28]C.L. Tang, *Fundamentals of Quantum Mechanics: For Solid State Electronics and Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2005). (ISBN-13 978-0-521-82952-6).
- [29]X.Y. Gu, S.H. Dong, *J. Math. Chem.* **49**, 2053 (2011).
- [30]S.M. Ikhdair, *Phys. Scr.* **83**, 015010 (2011)
- [31]M.C. Zhang, G.Q. Huang-Fu, *Int. J. Quant. Chem.* **112**, 1036 (2012).
- [32]I. Nasser, M.S. Abdelmonem, A. Abdel-Hady, *Mol. Phys.* **111**, 1 (2013).
- [33]L.H. Zhang, X.P. Li, C.S. Jia, *Int. J. Quant. Chem.* **111**, 1870 (2011).
- [34]M. Hamzavi, S.M. Ikhdair, K.E. Thylwe, *J. Math. Chem.* **51**, 227 (2013).
- [35]K.J. Oyewumi, O.J. Oluwadare, K.D. Sen, O.A. Babalola, *J. Math. Chem.* **51**, 976 (2013).
- [36]M. Hamzavi, A.A. Rajabi, H. Hassanabadi, *Mol. Phys.* **110**, 389 (2012).
- [37]H.C. Feng, Z.Z. Xiang, L.I. Yan, *Acta. Phys. Sin.* **8**, 561 (1999).
- [38]R. Sever, C. Tezan, O. Yesiltas, M. Bucurgat, *Int. J. Theor. Phys.* **47**, 2243 (2008).
- [39]A.S. De Castro, A. Armat, H. Hassanabadi, *Eur. Phys. J. Plus* **129**, 216 (2014).
- [40]G. Chen, *Acta. Phys. Sin.* **53**, 608 (2004).
- [41]V.M. Villalba, C. Rojas, *Int. J. Mod. Phys. A* **21**, 313 (2006).
- [42]A.N. Ikot, L.E. Akpabio, E.B. Umoren, *J. Sci. Res.* **3**, 25 (2011).
- [43]A.N. Ikot, O.A. Awoga, H. Hassanabadi, E. Maghsoodi, *Commun. Theor. Phys.* **61**, 457 (2014).
- [44]A.N. Ikot, H.P. Obong, T.M. Abbey, S. Zare, M. Ghafourian, H. Hassanabadi, *Few-Body Syst.* **57**, 807 (2016).
- [45]U.S. Okorie, E.E. Ibekwe, M.C. Onyeaju, A.N. Ikot, *Eur. Phys. J. Plus* **133**, 433 (2018).
- [46]U.S. Okorie, A.N. Ikot, M.C. Onyeaju, E.O. Chukwuocha, *J. Mol. Mod.* **24**, 289 (2018)
- [47]B.J. Falaye, S.M. Ikhdair, M. Hamzavi, *Few-Body Syst.* **56**, 63 (2015).
- [48]H. Hassanabadi, E. Maghsoodi, S. Zarrinkamar, *Eur. Phys. J. Plus* **127**, 31 (2012).
- [49]H. Hassanabadi, E. Maghsoodi, S. Zarrinkamar, H. Rahimov, *Mod. Phys. Lett. A* **26**, 2703 (2011).
- [50]H. Hassanabadi, L.L. Lu, S. Zarrinkamar, G. Liu, H. Rahimov, *Acta Phys. Pol., A* **122**, 650 (2012).
- [51]H. Hassanabadi, E. Maghsoodi, A. Aydogdu, *Phys. Scr.* **86**, 015005 (2012).
- [52]C. Tezcan, R. Sever, *J. Math. Phys.* **55**, 032104 (2014).
- [53]L.H. Zhang, X.P. Li, C.S. Jia, *Phys. Lett. A* **372**, 2201 (2008).
- [54]L.H. Zhang, X.P. Li, C.S. Jia, *Int. J. Quantum Chem.* **111**, 1870 (2011) 9 Page 16 of 16 A. N. Ikot et al.
- [55]A.N. Ikot, H. Hassanabadi, T.M. Abbey, *Commun. Theor. Phys.* **64**, 637 (2015).
- [56]M. Eshghi, H. Mehraban, S.M. Ikhdair, *Acta Math. Appl. Sin. Engl. Ser.* **31**, 1131 (2015).
- [57]C. Tezcan, R. Sever, *Int. J. Theor. Phys.* **48**, 337 (2008).
- [58]M.C. Zhang, G.H. Sun, S.H. Dong, *Phys. Lett. A* **374**, 704 (2010).

- [59]C. Berkdemir, Application of the Nikiforov–Uvarov method in quantum mechanics, in *Theoretical Concept of Quantum Mechanics*, vol. 11, ed. by M.R. Pahlavani (InTech, Rijeka, 2012).
- [60]S.H. Dong, *Factorization Method in Quantum Mechanics* (Springer, Berlin, 2007).
- [61]U.S. Okorie, E.E. Ibekwe, A.N. Ikot, M.C. Onyeaju, E.O. Chukwuocha, *J. Kor. Phys. Soc.* **73**, 1211 (2018.)
- [62]U.S. Okorie, A.N. Ikot, M.C. Onyeaju, E.O. Chukwuocha, *Rev. Mex. Fis.* **64**, 608 (2018).
- [63]Z. Ocak, H. Yanar, M. Saltı, O. Aydoğdu, *Chem. Phys.* **513**, 252 (2018).
- [64]K.J. Oyewumi, *Int. J. Theor. Phys.* **49**, 1302 (2010).
- [65]F. Taskin, G. Kocak, *Chin. Phys. B* **19**, 090314 (2010).
- [66]W.C. Qiang, S.H. Dong, *Eur. Phys. Lett.* **89**, 10003 (2010).
- [67]S.H. Dong, A. Gonzalez-Cisneros, *Ann. Phys.* **323**, 1136 (2008).
- [68]X.Y. Gu, S.H. Dong, Z.Q. Ma, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 035303 (2009).
- [69]S.M. Ikhdaïr, J. Abu-Hasna, *Phys. Scr.* **83**, 025002 (2011).
- [70]S.H. Dong, D. Morales, J. Garcia-Ravelo, *Int. J. Mod. Phys. E* **16**, 189 (2007).
- [71]F.A. Serrano, X.Y. Gu, S.H. Dong, *J. Math. Phys.* **51**, 082103 (2010).
- [72]S.H. Dong, M. Cruz-Irisson, *J. Math. Chem.* **50**, 881 (2012).
- [73]O.J. Oluwadare, K.J. Oyewumi, *Eur. Phys. J. Plus* **133**, 422 (2018).
- [74]B.J. Falaye, S.M. Ikhdaïr, M. Hamzavi, *J. Math. Chem.* **53**, 1325 (2015).
- [75]B.J. Falaye, K.J. Oyewumi, S.M. Ikhdaïr, M. Hamzavi, *Phys. Scr.* **89**, 115204 (2014).
- [76]S.H. Dong, *Commun. Theor. Phys.* **55**, 969 (2011).
- [77]J.Y. Guo, Z.Q. Sheng, *Phys. Lett. A* **338**, 90 (2005).
- [78]F. Chafa, A. Chouchaoui, M. Hachemane, F.Z. Ighezou, *Ann. Phys.* **322**, 1034 (2007).
- [79]A. Diaf, A. Chouchaoui, *Phys. Scr.* **84**, 015004 (2011).
- [80]A. Chouchaoui, *Ann. Phys.* **312**, 431 (2004).
- [81]H. Hassanabadi, B.H. Yazarloo, S. Zarrinkamar, H. Rahimov, *Commun. Theor. Phys.* **57**, 339 (2012).
- [82]S.H. Dong, *Factorization Method in Quantum Mechanics* (Springer, Berlin, 2007).
- [83]D. Agboola, Y.Z. Zhang, *Mod. Phys. Lett. A* **27**, 1250112 (2012).
- [84]F. Pan, J.R. Klauder, J.P. Draayer, *Phys. Lett. A* **262**, 131 (1999).
- [85]H. Çiftçi, R.L. Hall, N. Saad, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 11807 (2003).
- [86]H. Çiftçi, R.L. Hall, N. Saad, *Phys. Lett. A* **340**, 388 (2005).
- [87]B.J. Falaye, *Cent. Eur. J. Phys.* **10**, 960 (2012).
- [88]S.M. Ikhdaïr, B.J. Falaye, *Phys. Scr.* **87**, 035002 (2013).
- [89]O. Bayrak, I. Boztosun, H. Ciftci, *Int. J. Quantum Chem.* **107**, 540 (2007).
- [90]I.A. Assi, A.J. Sous, A.N. Ikot, *Eur. Phys. J. Plus* **132**, 525 (2017).
- [91]A.N. Ikot, E.O. Chukwuocha, M.C. Onyeaju, C.A. Onate, B.I. Ita, M.E. Udoh, *Pram. J. Phys.* **90**, 22 (2018).
- [92]A.N. Ikot, U.S. Okorie, G.J. Rampho, P.O. Amadi, *Int. J. Thermophys.* **42**, 10 (2021).

- [93]H.Yukawa, Proc. Phys. Math. Soc. Jap. **17**, 48 (1935).
- [94]James P. Edwards, Urs Gerber, Christian Schubert, Maria A. Trejo¹, and Axel Weber, Prog. Theor. Exp. Phys. **2017**, 083A01 (13 pages).
- [95]R.L. Greene, C. Aldrich, Phys. Rev. A **14**, 2363 (1976).
- [96]C.A. Onate, M.C. Onyeaju, A.N. Ikot, O. Ebomwonyi, Eur. Phys. J. Plus **132**, 462 (2017).
- [97]A.N. Ikot, U. S. Okorie, R. Sever, and G.J. Rampho. Eur. Phys. J. Plus 134 (2019) 386.
- [98]A.N. Ikot, U.S. Okorie, R. Sever, G.J. Rampho, Eur. Phys. J. Plus **134**, 386 (2019).
- [99]H. Hellmann and W. Kassatotchkin, J. Chem. Phys. 4, 324 (1936).
- [100]Roger D. Woods et David S. Saxon, Physical Review, vol. 95, juillet 1954, p. 577-578.
- [101]S.M. Ikhdair, R. Sever, Cent. Eur. J. Phys. **8**, 652 (2010).
- [102]P. M. Morse, vibrational levels. Phys. Rev. 1929, 34, 57-64.

Abstract

In this work, the radial Schrodinger equation is solved approximately for generalized Morse potential with the newly proposed NUFA method. This method is achieved by the combination of the Nikiforov–Uvarov (NU) method, the parametric NU method and the functional analysis approach. Its simplicity eliminates the rigorous mathematical manipulations, as encountered in other techniques. The eigensolutions obtained using NUFA method are in agreement with the ones obtained in literatures for the potential models considered. This method can be used to solve few body problems in nuclear physics, particle physics, as well as molecular and chemical physics.

Key words: The Schrödinger, wave function, the NU method, the NUAF method, the generalized Morse potential.

Résumé

Dans ce travail, l'équation radiale de Schrödinger est résolue approximativement pour le potentiel de Morse généralisé avec la méthode NUFA récemment proposée. Cette méthode est obtenue par la combinaison de la méthode de Nikiforov–Uvarov (NU), la méthode paramétrique NU et l'approche d'analyse fonctionnelle. Sa simplicité élimine les manipulations mathématiques rigoureuses rencontrées dans d'autres techniques. Les solutions propres obtenues utilisant la méthode NUFA sont en accord avec ceux obtenus dans la littérature pour les modèles potentiels considérés. Cette méthode peut être utilisée pour résoudre quelques problèmes en physique nucléaire, en physique des particules, ainsi qu'en physique moléculaire.

Mots clés : l'équation de Schrödinger, fonction d'onde, la méthode NU, la méthode NUFA, le potentiel de Morse généralisé.

ملخص

في هذا العمل ، تم حل معادلة شرودنجر القطرية تقريبا لكمون مورس المعمم باستخدام طريقة التحليل الوظيفي لنيكيفوروف-ايفاروف (NUAF) المقترحة مؤخرا. تم الحصول على هذه الطريقة من خلال الجمع بين طريقة نيكيفوروف-ايفاروف (NU) ، طريقة نيكيفوروف-ايفاروف (NU) الوسيطة وتقريب التحليل الوظيفي. بساطتها تقضي على المعالجات الرياضية الصارمة التي واجهتها في التقنيات الأخرى. الحل الذاتي التي تم الحصول عليها باستخدام طريقة NUFA متوافقة مع تلك التي تم الحصول عليها في الأدبيات للنماذج الأخرى. يمكن استخدام هذه الطريقة لحل بعض المسائل في الفيزياء النووية وفيزياء الجسيمات وكذلك في الفيزياء الجزيئية.

كلمات مفتاحية: معادلة شرودنجر ، دالة الموجة ، طريقة NU ، طريقة NUFA ، كمون مورس المعمم.