

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE AKLI MOHAND OULHADJ DE BOUIRA



Faculté des Sciences et des Sciences Appliquées
Département de physique

Mémoire de fin d'études

Présenté par :

MECHETEM Soumia

TAIBI Noura

En vue de l'obtention du diplôme de **Master** en :

Filière : Physique

Spécialité : Physique théorique

Thème :

**Etude de certains systèmes de la physique quantique par différentes
méthodes mathématique**

Devant le jury composé de :

Mme.BOUCHEMLA Nedjma	MCB	UAMOB	Présidente
Mr.SADOUN Mouhamed Améziane	MCB	UAMOB	Encadreur
Mr.BENAICHE Salim	MAA	UAMOB	Examineur
Mr.ZAHAM Bouzid	MCB	UAMOB	Examineur
Mr.BOUDRAF Mohamed Ahmed	MCB	UAMOB	Invité

Année Universitaire : 2018/2019

REMERCIEMENT

Le travail présenté dans ce mémoire a été entièrement réalisé au sein du département de Physique de l'Université de Bouira.

Nous remercions tout d'abord Dieu le tout puissant qui à nous éclaire le bon chemin.

*Nous remercions vivement l'encadreur de mémoire le **Monsieur M.A. SADOUN** de notre Université, à qu'il nous exprimons également toute nos gratitude, pour avoir proposé ce sujet, mais surtout pour avoir encadrés et guidés, pour son soutien et ses multiples coups de main.*

*Nos remerciements s'adressent également à **Madame N.BOUCHEMLA** d'avoir bien voulu présider le jury de soutenance.*

*Nous remercions les membres de jury à **Monsieur S.BENAICHE**, à **Monsieur B.ZAHAM** et **Monsieur M.A. BOUDRAF** pour leur contribution à l'évaluation de ce travail. Qu'iles trouvent ici toute notre gratitude.*

Nos remerciements vont également à tous nos proches amis de la Faculté de Physique pour leur amitié et disponibilité.

Finalement, nous tenons à exprimer notre profonde reconnaissance à nos familles et à tous mes proches pour leur inestimable affection, leurs soutiens et leurs encouragements sans cesse renouvelés. A tous ces derniers, nous exprimons notre reconnaissance et notre profonde gratitude.

Table des matières

1	Introduction générale	3
2	Mécanique quantique supersymétrique	6
2.1	Intoduction :	6
2.2	Méthode de la mécanique supersymetrique	7
2.2.1	Hamiltoniens partenaires :	9
2.2.2	Invariance de forme des potentiels superpartenaires :	11
2.2.3	La relation de recurence	14
2.3	Application : Etude des propriétés thermodynamiques	16
2.3.1	La fonction de partition	16
2.3.2	Potentiel de morse :	17
2.3.3	Potentiel de Poschel-Teller modifié :	22
2.3.4	potentiel Hulthen :	24
2.4	Propriétés thermodynamiques	28
2.4.1	Potentiel de Morse	28
2.4.2	Le potentiel de Poschell-Teller modifié	30
3	Méthode des iterrations asymptotique (AIM)	32
3.1	Introduction	32
3.2	Méthode des itérations asymptotiques (AIM)	32

3.3	Equation de Schrödinger pour une particule soumise à un potentiel hyperbolique déformé	35
3.4	Equation de Schrödinger pour une particule dans un potentiel diatomique déformé	39
4	Particule de Klein-Gordon dans des potentiels vecteur et scalaire de Hulthén modifié	42
4.1	Introduction	42
4.2	Potentiels vecteur et scalaire de Hulthén modifiés	44
4.3	Construction de l'intégrale de chemin	45
4.4	Validité de l'approximation du terme centrifuge :	50
4.5	Fonction de Green et équation du spectre de l'énergie	51
4.6	Conclusion	55
5	Conclusion générale	56

Chapitre 1

Introduction générale

La physique quantique est une branche de la physique qui permet l'étude des systèmes à l'échelle microscopique. Cette étude consiste en la recherche des fonctions d'onde et des énergies car toutes les informations relatives aux systèmes étudiés sont contenues dans ces deux grandeurs. La physique quantique se présente sous plusieurs formulations, la formulation de Schrödinger[1, 2] qui est une formulation analytique basée sur la résolution d'une équation aux dérivées partielles, de Heisenberg[4, 3], de Dirac[5] qui sont deux formulations algébriques basées sur le calcul matriciel et enfin l'approche des intégrales de chemin[6, 7] qui est une formulation "géométrique" basée sur le calcul d'intégrales.

Dans le domaine non relativiste l'étude de ces systèmes quantiques se fait par la résolution de l'équation de Schrödinger. Dans le domaine relativiste ce sont les équations de Klein-Gordon et de Dirac qui permettent d'obtenir les fonctions d'ondes et les énergies du système. Parmi ces méthodes on cite la méthode de Nikiforov-Uvarov[8], la méthode des itérations asymptotiques[9], la mécanique quantique supersymétrique[10] etc. Les deux premières méthodes sont purement mathématiques et sans aucune considération physique. Elles sont basées respectivement sur des changements de variables permettant de ramener l'équation différentielle en question à une forme particulière et la prise en compte du comportement asymptotique des fonctions. Ces deux méthodes permettent une résolution directe des équations de la physique quantique. Pour la mécanique quan-

tique supersymétrique par contre, c'est une technique mathématique algébrique qui utilise des concepts physiques à savoir la supersymétrie et l'invariance de forme. Enfin, pour la formulation des intégrales de chemins, l'approche est complètement différente, elle est adaptée à la fois au domaine non relativiste et relativiste. C'est une formulation lagrangienne de la physique quantique. Elle est basée sur la détermination du propagateur quantique relatif au système étudié par le calcul d'une intégrale fonctionnelle. Ce propagateur qui est la grandeur clé des intégrales de chemin comporte toutes les informations liées au système étudié.

Il est important de mentionner, à ce niveau, que la difficulté d'obtenir des solutions exactes des équations de la physique quantique provient du type d'interaction mise en jeu. Les interactions nucléaires, atomiques et interatomiques décrites par des potentiels centraux sont parmi ces interactions qui conduisent à des équations très particulières et difficiles à résoudre. La difficulté réside dans la forme mathématique du potentiel auquel est soumis le système ainsi que le terme centrifuge $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2}$ présent dans la partie radiale des équations obtenues. C'est pourquoi il est difficile et parfois impossible d'évaluer le spectre d'énergie des états l et se contenter seulement des états s . Cependant, il est à noter qu'une approximation du terme centrifuge largement utilisée dans la littérature a été introduite pour remédier à ce problème et pouvoir ainsi évaluer les fonctions d'onde et le spectre de l'énergie pour n'importe quelle valeur de l .

Dans ce mémoire, nous nous proposons d'étudier quelques systèmes quantiques sans spin, non relativistes et relativistes par trois méthodes parmi celles citées ci-dessus. Il s'agit de la mécanique supersymétrique, la méthode des itérations asymptotiques et enfin la formulation des intégrales de chemin.

Ce travail est subdivisé de la manière suivante :

Dans le premier chapitre nous allons déterminer les propriétés thermodynamiques de certains systèmes quantiques déjà étudiés, il s'agit du potentiel de Morse et le potentiel de Poschl-Teller modifié . Après avoir calculer les fonctions d'ondes et les énergies des systèmes, qui sont des résultats déjà obtenus, on définit dans chaque cas la fonction de

partition relative au système pour ensuite déterminer l'énergie interne du système, son énergie libre et la chaleur spécifique.

Le deuxième chapitre sera consacré à la résolution de l'équation de Schrödinger relative à deux systèmes physiques. Le premier est constitué d'une particule non relativiste soumise à un potentiel hyperbolique déformé et l'autre soumis à un potentiel diatomique déformé par la méthode des itérations asymptotiques. Cette méthode, par un changement de variables adéquat, permet de résoudre les équations différentielles homogènes du second ordre dont les solutions se présentent souvent sous formes de certains polynômes, à savoir le polynôme d'Hermite, le polynôme de Laguerre,...etc.

Dans le troisième chapitre, nous présentons l'étude d'un système quantique constitué d'une particule relativiste sans spin en mouvement sous l'action d'un potentiel à quatre paramètres. L'étude consiste au calcul du propagateur sous sa forme compacte pour ensuite déterminer les fonctions d'onde normalisées et les énergies du système. Dans ce but, nous construisons d'abord l'intégrale de chemin à partir de l'équation de Klein-Gordon relative au système. Ensuite en utilisant le principe de Shwinger nous passons à la forme intégrale que une fois évaluée, la fonction de Green est obtenue sous sa forme compacte ainsi que l'équation donnant le spectre de l'énergie.

Nous terminons enfin par une conclusion générale.

Chapitre 2

Mécanique quantique supersymétrique

2.1 Introduction :

La théorie de la supersymétrie a été élaborée dans le but d'unifier les interactions fondamentales. En physique des particules, Miyazawa[11] était le premier à proposer un procédé d'unification possible basé sur une superalgèbre caractérisée par une combinaison de relations de commutation et d'anticommutation d'opérateurs. C'est une symétrie entre états bosoniques et fermioniques [12, 13, 14]. Chaque particule bosonique (état bosonique), selon cette symétrie, a un superpartenaire qui est une fermionique (état fermionique) et inversement. Depuis, elle est devenue un concept algébrique et une technique de calcul largement utilisés dans de nombreuses théories telles que la théorie des champs [15], la théorie des cordes[17, 18] et la théorie de la relativité générale. En mécanique quantique, la supersymétrie peut être considérée comme une formulation mathématique qui permet une résolution exactes des équations en construisant de nouvelles formes de potentiels solubles analytiquement. Le développement de la mécanique quantique supersymétrique (MQSUSY) comme technique de calcul est basé sur la méthode de factorisation de Schrödinger [19]. Ceci a conduit à l'élaboration d'un formalisme mathématique

basé sur des concepts physiques, et permet ainsi la résolution des équations de la physique quantique dans les deux domaines relativiste et non relativiste. La technique de la mécanique quantique supersymétrique est largement utilisée dans l'étude des systèmes en interaction mettent en jeu des potentiels avec des formes complexes. Elle consiste à définir à partir du potentiel en question un superpotentiel avec une forme simplifiée et vérifier ensuite l'invariance de forme. Dans ce chapitre, nous nous proposons de d'étudier certains systèmes quantiques dans le but de déterminer leurs propriétés thermodynamiques.

2.2 Méthode de la mécanique supersymétrique

La supersymétrie en mécanique quantique, selon l'approche de Schrödinger peut être décrite par une paire d'Hamiltoniens bosoniques. Cette technique consiste à exprimer l'Hamiltonien d'une particule de masse M à une dimension

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2.1)$$

sous la forme d'un produit de deux opérateurs différentiels du premier ordre.

A partir l'équation de Schrödinger relative à l'état fondamental décrit par la fonction $\Psi_0(x)$

$$\hat{H}_- \Psi_0(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V_-(x) \right] \Psi_0(x) = 0 \quad (2.2)$$

où $V_-(x) = V(x) - E_0$, il est facile de factoriser l'Hamiltonien \hat{H}_- comme suit :

$$\hat{H}_- = A^+ A \quad (2.3)$$

où les opérateurs A^+ et A sont des opérateurs d'échelle (opérateur d'annihilation et de création) définis par

$$A = \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{d}{dx} + W(x), \quad (2.4)$$

$$A^+ = -\frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{d}{dx} + W(x) \quad (2.5)$$

et $W(x)$ est une fonction qui sera définie ultérieurement comme "superpotentiel".

Les opérateurs de création et d'annihilation A et A^+ sont une forme généralisée des opérateurs de création et d'annihilation standards introduit dans l'étude algébrique de l'oscillateur harmonique ordinaire. A^+ et A dépendent du potentiel $V(x)$ et de l'énergie E_0 du niveau fondamental. Ce sont des opérateurs adjoints l'un de l'autre. En tenant compte de (2.2) et (2.3), la fonction $W(x)$ doit satisfaire l'équation

$$W''(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} W'(x) = V(x) - E_0 \quad (2.6)$$

Cette équation différentielle non linéaire n'est autre que l'équation de Riccati bien connue où $W'(x) = \frac{d}{dx}W(x)$. La fonction $W(x)$ est une fonction réelle appelée potentiel supersymétrique [20, 21] ou "superpotentiel" en MQSUSY. En utilisant les définitions (2.3) et (2.4) et l'équation (2.2), on obtient une équation différentielle du premier ordre donnée par :

$$A\Psi_0(x) = \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{d}{dx} + W(x)\right)\Psi_0(x) = 0 \quad (2.7)$$

En connaissant la fonction d'onde relative à l'état fondamental, cette équation permet de déterminer le superpotentiel $W(x)$, c'est à dire :

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\Psi_0'(x)}{\Psi_0(x)} \quad (2.8)$$

De la même manière, en connaissant le superpotentiel $W(x)$, on peut obtenir la fonction d'onde de l'état fondamental par l'équation :

$$\Psi_0(x) = \Psi_0^{(-)}(x) = N_0 \exp \left[-\frac{\sqrt{2M}}{\hbar} \int^x W(x') dx' \right] \quad (2.9)$$

où $\Psi_0^{(-)}(x)$ est la fonction propre de H_- supposée de carré sommable et N_0 est un facteur de normalisation.

$$\Psi_0(x) = \exp\left(\int Z(x) dx\right) \quad (2.10)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right] \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (2.11)$$

$$\frac{\Psi''(x)}{\Psi(x)} = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \quad (2.12)$$

On pose :

$$\frac{\Psi_0'(x)}{\Psi_0(x)} = Z'; \left(\frac{\Psi_0'(x)}{\Psi_0(x)}\right)^2 = Z^2; \frac{2m}{\hbar^2} V = v; \frac{2m}{\hbar^2} E = \varepsilon \quad (2.13)$$

Avec $W(x)$ est le superpotentiel

$$Z' + Z^2 = v(x) - \varepsilon_0 \quad (2.14)$$

D'après l'équation (2.2), on a

$$\hat{H}_- \Psi_0^{(-)}(x) = E_0^{(-)} \Psi_0^{(-)}(x) = 0, \quad (2.15)$$

ceci conduit donc résultat que l'énergie de l'état fondamental a pour valeur : $E_0^{(1)} = 0$

2.2.1 Hamiltoniens partenaires :

En faisant un changement dans l'ordre des opérateurs A et A^+ dans l'expression de l'Hamiltonien $\hat{H}_- = A^+A$, on peut définir l'Hamiltonien $\hat{H}_+ = AA^+$ correspondant au un nouveau potentiel $V_+(x)$. Autrement dit, H_+ peut s'écrire sous la forme

$$\hat{H}_+ = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V_+(x) \quad (2.16)$$

où $V_+(x)$ est défini en terme du superpotentiel $W(x)$ par

$$V_+(x) = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2M}}W'(x) \quad (2.17)$$

Les potentiels $V_-(x)$ et $V_+(x)$ sont des potentiels partenaires supersymétriques et comme \hat{H}_- et \hat{H}_+ sont les hamiltoniens correspondant respectivement à $V_-(x)$ et $V_+(x)$, ils sont par conséquent des Hamiltoniens partenaires supersymétriques. Pour établir le lien entre les valeurs propres et les fonctions propres de \hat{H}_- et \hat{H}_+ , notons d'abord que leurs valeurs propres sont

$$E_n^{(\pm)} \geq 0 \quad (2.18)$$

D'autre part, on a

$$\begin{aligned} \hat{H}_+(A\Psi_n^{(-)}(x)) &= AA^+A\Psi_n^{(-)}(x) \\ &= A\hat{H}_-\Psi_n^{(-)}(x) \\ &= E_n^{(-)}A\Psi_n^{(-)}(x) \end{aligned} \quad (2.19)$$

et aussi

$$\begin{aligned} \hat{H}_-(A^+\Psi_n^{(+)}(x)) &= A^+AA^+\Psi_n^{(+)}(x) \\ &= A^+\hat{H}_+\Psi_n^{(+)}(x) \\ &= E_n^{(+)}A^+\Psi_n^{(+)}(x) \end{aligned} \quad (2.20)$$

Les équations (2.20) et (2.21) signifient que $A\Psi_n^{(-)}(x)$ est une fonction propre de \hat{H}_+ pour la valeur propre $E_n^{(-)}$ et $A^+\Psi_n^{(+)}(x)$ est une fonction propre de \hat{H}_- pour la valeur propre $E_n^{(+)}$. A partir de ces relations, on en déduit que les valeurs propres et les fonctions propres des Hamiltoniens \hat{H}_- et \hat{H}_+ sont reliées de la manière suivante :

$$E_n^{(+)} = E_{n+1}^{(-)}; E_0^{(-)} = 0 \quad (2.21)$$

$$\Psi_n^{(+)} = \sqrt{E_{n+1}^{(-)}} A \Psi_{n+1}^{(-)} \quad (2.22)$$

$$\Psi_{n+1}^{(-)}(x) = \sqrt{E_n^{(+)}} \Psi_n^{(+)} \quad (2.23)$$

On voit donc qu'il est possible de déterminer les fonctions propres de \hat{H}_+ par application de l'opérateur A sur celles de \hat{H}_- et vice-versa par application de l'opérateur A^+ à l'exception de la fonction d'onde de l'état fondamental qui ne possède pas de partenaire supersymétrique. On remarque que l'opérateur A (respectivement A^+) transforme non seulement une fonction propre de \hat{H}_- (respectivement de \hat{H}_+) en une fonction propre de \hat{H}_+ (respectivement de \hat{H}_-) avec la même énergie, mais il annihile (créé) aussi un noeud dans la fonction propre. La fonction d'onde de l'état fondamental de \hat{H}_+ est annihilée par l'opérateur A .

2.2.2 Invariance de forme des potentiels superpartenaires :

Considérons deux potentiels partenaire supersymétriques $V_-(x)$ et $V_+(x)$ les hamiltoniens associés

$$\hat{H}_\pm = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V_\pm(x) \quad (2.24)$$

ont des spectres identiques à l'exception de $E_0^{(1)} = 0$. Supposons de plus qu'ils obéissent à la condition d'invariance de forme suivante (GENDENSHTEIN 1983) :

$$V_+(x, a_0) = V_-(x, a_1) + R(a_1) \quad (2.25)$$

où a_0 représente un jeu de paramètres, $a_1 = f(a_0)$ et où la fonction $R(a_1)$ représente un reste et elle est indépendante de la variable x . On peut alors écrire une relation entre les deux hamiltoniens :

$$\hat{H}_+(a_0) = \hat{H}_-(a_1) + R(a_1) \quad (2.26)$$

de sorte que

$$\begin{aligned}\hat{H}_+(a_0)\Psi_0^{(1)}(x, a_0) &= (E_0^{(1)}(a_1) + R(a_1))\Psi_0^{(1)}(x, a_1) \\ &= R(a_1)\Psi_0^{(1)}(x, a_1)\end{aligned}\tag{2.27}$$

ce qui entraine

$$\Psi_0^{(+)}(x, a_0) = \Psi_0^{(-)}(x, a_1)\tag{2.28}$$

$$E_0^{(+)}(a_0) = R(a_1)\tag{2.29}$$

En mettant d' autre part à profit la correspondance (2.21) entre les spectres, on obtient l' énergie du premier niveau excité de H_- :

$$E_1^{(-)}(a_0) = E_0^{(+)}(a_0) = R(a_1)\tag{2.30}$$

ainsi que la fonction d'onde associée, en utilisant :

$$\begin{aligned}\Psi_0^{(-)}(x, a_0) &= \frac{1}{\sqrt{E_0^{(2)}(a_0)}}A^+(a_0)\Psi_0^{(+)}(x, a_0) \\ &= \frac{1}{\sqrt{R(a_1)}}A^+(a_0)\Psi_0^{(-)}(x, a_1)\end{aligned}\tag{2.31}$$

où $\Psi_0^{(-)}(x, a_1)$ est donnée par le superpotentiel $W(x)$ à l' aide de (2.9) et par la relation $a_1 = f(a_0)$ qui découle de l'invariance de forme.

Les relations (2.28) et (2.29) se généralisent à niveau quelconque :

$$\Psi_n^{(+)}(x, a_0) = \Psi_n^{(-)}(x, a_1)\tag{2.32}$$

$$E_n^{(+)}(a_0) = E_n^{(-)}(a_1) + R(a_1) \quad (2.33)$$

Cela suggère de réitérer le processus (2.26) en définissant une famille d'hamiltoniens constituant des paires successives de partenaires supersymétriques, de manière à ce que le n ème niveau de H_1 corresponde à l'état fondamental du $(n-1)$ -ième hamiltoniens :

$$\hat{H}^{(s)}(a_0) = -\frac{\hbar}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V^{(s)}(x, a_0) \quad (2.34)$$

$$\hat{H}^{(s+1)}(a_0) = -\frac{\hbar}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V^{(s+1)}(x, a_0) \quad (2.35)$$

$$V^{(s+1)}(x, a_0) = V^{(s)}(x, a_1) + R(a_1) \quad (2.36)$$

on obtient ainsi une récurrence de la forme :

$$\hat{H}^{(0)}(a_0) = -\frac{\hbar}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x, a_0) \quad (2.37)$$

$$\hat{H}^{(1)}(a_0) = \hat{H}^{(0)}(a_1) + R(a_1) \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(2)}(a_0) &= \hat{H}^{(1)}(a_1) + R(a_1) \\ &= \hat{H}^{(0)}(a_2) + R(a_2) + R(a_1). \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\hat{H}^{(s)}(a_0) = \hat{H}^{(0)}(a_s) + \sum_{k=1}^s R(a_k) \quad (2.40)$$

Ces hamiltoniens successifs ne diffèrent finalement que par une constante additive et par la valeur des paramètres. Ils ont donc memes fonctions propres aux valeurs des

paramètre près :

$$E_n^{(s)}(a_0) = E_n^{(s-1)}(a_1) + R(a_1) \quad (2.41)$$

la relation (2.39) entraîne

$$E_n^{(s)}(a_0) = E_n^{(0)}(a_s) + \sum_{k=1}^s R(a_k) \quad (2.42)$$

et, par ailleurs

$$E_n^{(s)}(a_0) = E_{n+1}^{(s-1)}(a_0) = \dots = E_{n+s}^{(0)}(a_0) \quad (2.43)$$

le spectre de $H^{(0)}(a_0)$ est donc totalement déterminé par (2.42) et (2.43) avec $n = 0$:

$$E_n^{(s)}(a_0) = \sum_{k=1}^s R(a_k) \quad (2.44)$$

2.2.3 La relation de recurence

La relation de recurence de la normalisation des coefficients $\int |\Psi(x)|^2 dx = 1$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n+1}^2(x, a_0) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n+1}(x, a_0) A^+(x, a_0) \Psi_n(x, a_1) dx \quad (2.45)$$

Quand $x \rightarrow \pm\infty$ $\Psi_{n+1}(x, a_0)$ et $\Psi_n(x, a_0)$ égal à zéro.

On obtient :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n+1}(x, a_0) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n(x, a_0) H_+(x, a_0) \Psi_n(x, a_1) dx \quad (2.46)$$

Où $H_+(x, a_0)$ peut écrire :

$$\begin{aligned}
H_+(x, a_0) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2x}{dx^2} + V_-(x, a_0) + R(a_1) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_-(x, a_0) + R(a_1)
\end{aligned} \tag{2.47}$$

$$= H_-(x, a_0) + R(a_1) \tag{2.48}$$

On remplace (2.47) dans (2.45) et (2.46) on obtient :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n+1}^2(x, a_0) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n(x, a_1) [H_{-(x, a_1)} + R(a_1)] \Psi_n(x, a_1) dx \tag{2.49}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n+1} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n(x, a_1) [E_n^{(-)}(a_1) + R(a_1)] \Psi_n(x, a_1) dx \tag{2.50}$$

$$= [E_n^{(-)}(a_1) + R(a_1)] \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^2(x, a_1) dx \tag{2.51}$$

$N_{n+1}(a_1)$ et $N_n(a_1)$ sont les coefficients de normalisation de $\Psi_{n+1}(x, a_0)$ et $\Psi_n(x, a_1)$ respectivement

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{+\infty} N_{n+1}^2(a_0) \Psi_{n+1}^2(x, a_0) dx \\
&= N_{n+1}^2(a_0) [E_n^{(-)}(a_1) + R(a_1)] \frac{1}{N_n^2(a_1)} \int_{-\infty}^{+\infty} N_n^2(a_1) \Psi_n^2(x, a_1) dx \\
&= N_{n+1}^2(a) [E_n^{(-)}(a_1) + R(a_1)] \frac{1}{N_n^2(a_1)} = 1
\end{aligned} \tag{2.52}$$

donc

$$N_{n+1}(a_0) = \frac{N_n(a_1)}{\sqrt{E_n^{(-)}(a_0) + R(a_1)}} \quad (2.53)$$

Cette relation est la relation de récurrence généralisée pour tous les potentiels invariants de forme.

2.3 Application : Etude des propriétés thermodynamiques

A partir de calcul de l'énergie on détermine la fonction de partition et grâce à cette dernière on peut déterminer les propriétés thermodynamiques (l'énergie interne U , l'énergie libre F et la chaleur spécifique C_v)

2.3.1 La fonction de partition

On définit la fonction de partition à l'état d'équilibre par :

$$Z(\beta_T) = \sum_{n=0} e^{-\beta_T E_n} \quad (2.54)$$

où : E_n est l'énergie du système, $\frac{1}{k\beta_T} = \beta_T$.

Quelques propriétés thermodynamiques

L'énergie libre

$$F(\beta_T) = -\frac{1}{\beta_T} \ln Z(\beta_T) \quad (2.55)$$

L'énergie interne

$$U(\beta_T) = -\frac{\partial}{\partial \beta_T} \ln Z(\beta_T) \quad (2.56)$$

Et la chaleur spécifique

$$C_v(\beta_T) = -\frac{\partial U}{\partial \beta_T} \quad (2.57)$$

2.3.2 Potentiel de morse :

Le potentiel de Morse décrit les interactions interatomiques dans les molécules diatomiques, il est défini par l'expression

$$V(x) = U_0 [\exp(-2\alpha x) - 2\exp(-\alpha x)] \quad (2.58)$$

La partie radiale de l'équation de Schrödinger relative à une particule sans spin de masse m soumise au potentiel de Morse s'écrit

$$\frac{d^2 R}{dx^2} + \frac{2mV_0}{\hbar^2} [E - e^{-2\alpha x} + 2e^{-\alpha x}] R = 0, \quad (2.59)$$

où nous avons considéré seulement les états s , c'est-à-dire $l = 0$.

En faisant le changement de variables $y = e^{-\alpha x}$, l'équation (2.59) devient

$$\frac{d^2 R}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{dR}{dy} + \frac{2mV_0}{\hbar^2 \alpha^2} \left[\frac{E}{y^2} + \frac{2}{y} - 1 \right] R = 0. \quad (2.60)$$

En posant $R(y) = e^{-\lambda y} (2\lambda y)^{\frac{b}{2}} F(y)$, nous obtenons

$$\begin{aligned} & e^{-\lambda y} (2\lambda y)^{\frac{b}{2}-2} \left\{ (2\lambda y)^2 F''(y) + (2\lambda y) 2\lambda [b+1-2y\lambda] F' \right. \\ & + \left[(2\lambda y)^2 \left(\lambda^2 - \frac{2vV_0}{\alpha^2 \hbar^2} - 2\lambda (2\lambda y) \left(\lambda b + \lambda - \frac{4vV_0}{\alpha^2 \hbar^2} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \lambda^2 b^2 + \frac{8vW\lambda^2}{\alpha^2 \hbar^2} \right) F(y) \right] \left. \right\} = 0 \end{aligned} \quad (2.61)$$

pour $W = \frac{\alpha^2 \hbar^2 \lambda^2}{8v}$.

Avec la transformation $z = 2\lambda y$ et en choisit $\lambda = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\alpha \hbar}$:

$$z = z \frac{d^2 F}{dz^2}(z) + [b+1-z] \frac{dF}{dz}(z) + \left(\lambda - \frac{b}{2} - \frac{1}{2} \right) F(z) = 0 \quad (2.62)$$

l'équation(2.62) permet d'utiliser le polynome comme solution.

$$zF'' + (b+1-z)F' + nF = 0 \quad F(z) = L_n^b(z) \quad (2.63)$$

donc

$$R_n(r) = N_n e^{-\frac{k}{2}e^{-\alpha(n-n_0)}} (ke^{-\alpha(n-n_0)})^{\frac{2\lambda-2n-1}{2}} L_n^{2\lambda-2n-1}(ke^{-\alpha(n-n_0)}) \quad (2.64)$$

avec $x = n - n_0$; $L_n^v(x)$ les polynomes de Laguerre généralisées.

La condition de normalisation :

$$\langle \Psi | \Psi' \rangle = \int_0^\infty r^2 R_n(r) R_n^{*'}(x) dr = 1 \quad (2.65)$$

donc :

$$\text{avec } 0 \leq n \leq [\lambda - \frac{1}{2}].$$

On utilise la méthode de fraction et Nieto and Simmons on obtient la normalisation et les vecteurs propres associés à polynome deLa Guerre

$$\Psi(x) = N(n, \lambda) y^{\lambda - (\frac{1}{2}) - n} \exp\left(-\frac{y}{2}\right) L_n^{(2\lambda-2n-1)}(y) \quad (2.66)$$

$$0 \leq n \leq [\lambda - \frac{1}{2}]$$

$$\text{ou } \lambda = \left(\frac{2mU_0}{\hbar^2 a^2}\right)^{\frac{1}{2}}; y = 2\lambda \exp(-\alpha x)$$

$$N(n, \lambda) = \left[\frac{\alpha(2\lambda - 2n - 1) \Gamma(n+1)}{\Gamma(2\lambda - n)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.67)$$

$Z(x) = A \exp(-\alpha x) + B$ on la remplace dans l'équation(2.14)on obtient

$$A = \beta; B = \frac{\alpha}{2} - \beta$$

$$\beta = \left(\frac{2mU_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

La forme de $V_+(x), V_-(x)$:

$$V_+(x, a_0) = [z(x)]^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dz}{dx} \quad (2.68)$$

on obtient :

$$V_+(x, a_0) = A^2 e^{-2\alpha x} + B^2 + 2A \left(B + \frac{\alpha}{2} \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \right) e^{-\alpha x} \quad (2.69)$$

et on a :

$$V_-(x, a_1) = [z(x)]^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dz(x)}{dx} \quad (2.70)$$

donc :

$$V_-(x, a_1) = A^2 e^{-2\alpha x} + B^2 + 2A \left(B + \frac{\alpha}{2} \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \right) e^{-\alpha x} \quad (2.71)$$

on a

$$R(a_1) = V_+(x, a_0) - V_-(x, a_1) \quad (2.72)$$

donc :

$$R(a_1) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(2\alpha \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \right) \quad (2.73)$$

avec :

$$a_0 = \frac{\alpha}{2} - \beta = B \text{ et } a = f(a_0) a_0 - \alpha;$$

donc

$$R(a_1) = \frac{\hbar^2}{2m} (a_0^2 - a_1^2) \quad (2.74)$$

$$E_n^{(-)}(a_0) = \frac{\hbar^2}{2m} (a_0^2 - a_n^2) \quad (2.75)$$

$$E_n^{(-)}(a_1) + R(a_1) = \frac{\hbar^2}{2m} [a_0^2 - (a + n\alpha + \alpha)^2] \quad (2.76)$$

L'opérateur $A^{(+)}(x, a_0)$ et l'état fondamental de la fonction d'onde $\Psi_0(x, a_0)$ non nor-

malisée sont données par :

$$A^+(x, a_0) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left(\frac{d}{dx} + \beta \exp(-\alpha x) + a_0 \right) \quad (2.77)$$

donc

$$\Psi_0(x, a_0) = \exp \left(-\frac{\beta}{\alpha} \exp(-\alpha x) + a_0 x \right) \quad (2.78)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} N_0^2(a_0) \Psi_0^2(x, a_0) dx = 1 \quad (2.79)$$

On obtient les coefficients des premiers vecteurs propres

$$N_0(a_0) = \frac{\sqrt{\alpha}}{(2\beta/\alpha)^{\frac{a_0}{\alpha}} [\Gamma(-2a_0/\alpha)]^{\frac{1}{2}}} \quad (2.80)$$

$$N_1(a_0) = \frac{1}{\left(\frac{2\beta}{\alpha}\right)^{-\left(\frac{a_0+2\alpha}{\alpha}\right)}} \left[\frac{\alpha}{\Gamma(-2\frac{a_0+2\alpha}{\alpha})} \right]^{\frac{1}{2}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (2a_0 + \alpha) \alpha \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (2.81)$$

$$N_2(a_0) = \left(\frac{2\beta}{\alpha}\right)^{-\left(\frac{a_0+2\alpha}{\alpha}\right)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (2a_0 + 3\alpha) \alpha \right]^{-\frac{1}{2}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (2a_0 + 2\alpha) 2\alpha \right]^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{\alpha}{\Gamma(-2(a_0 + 2\alpha)/\alpha)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.82)$$

Avec la définition de la fonction gamma, nous avons pour $N_n(a_0)$

$$a_0 + n\alpha \langle 0 \rangle \\ \implies n \langle \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2\alpha^2}} - \frac{1}{2} \rangle$$

La non normalisation des fonctions d'ondes s'obtient à partir des équations (2.6), (2.77) et (2.78)

$$\Psi_1(x, a_0) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} (2\beta \exp(-\alpha x) + 2a_0 + \alpha) \exp\left(-\frac{\beta}{\alpha} \exp(-\alpha x) + (a_0 + \alpha)x\right) \quad (2.83)$$

et

$$\begin{aligned} \Psi_2(x, a_0) &= \frac{\hbar}{2m} [4\beta^2 \exp(-2\alpha x) + (10\beta\alpha + 8\beta a_0) \exp(-\alpha x) \\ &\quad + 4a_0^2 + 10a_0\alpha + 6\alpha^2] \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{\beta}{\alpha} \exp(-\alpha x) + (a_0 + 2\alpha)x\right) \end{aligned} \quad (2.84)$$

La normalisation des fonctions d'ondes

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\Gamma(2\lambda - 1)}\right)^{\frac{1}{2}} (2\lambda)^{\left(\frac{2\lambda-1}{2}\right)} \exp\left(-\frac{2\lambda-1}{2}\alpha x - \lambda \exp(-\alpha x)\right) \quad (2.85)$$

en plus

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= \left(\frac{\alpha}{(2\lambda-2)\Gamma(2\lambda-3)}\right)^{\frac{1}{2}} (2\lambda)^{\left(\frac{2\lambda-3}{2}\right)} (2\lambda-2-2\lambda \exp(-\alpha x)) \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{2\lambda-3}{2}\alpha x - \lambda \exp(-\alpha x)\right) \end{aligned} \quad (2.86)$$

La méthode de récurrence :

$$\begin{aligned}
\Psi_2(x) &= \left(\frac{2\alpha}{(2\lambda-3)(2\lambda-4)\Gamma(2\lambda-5)} \right)^{\frac{1}{2}} (2\lambda)^{\left(\frac{2\lambda-5}{2}\right)} \\
&\times [2\lambda^2 \exp(-2\alpha x) - 2\lambda(2\lambda-3) \exp(-\alpha x) + 2\lambda^2 - 7\lambda + 6] \\
&\times \exp\left(-\frac{2\lambda-5}{2}\alpha x - \lambda \exp(-\alpha x)\right)
\end{aligned} \tag{2.87}$$

$\lambda = \frac{\beta}{\alpha}$ ce résultat consiste à la résultat qui obtient en équation (2.66)

2.3.3 Potentiel de Poschel-Teller modifié :

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \lambda(\lambda+1) \sec^2 hx \tag{2.88}$$

D'après [48] on obtient :

$$E^{(-)}(a_1) + R(a_1) = \frac{2\hbar}{2m} (n+1) a_1 - \frac{\hbar^2}{2m} (n^2 - 1); n = 1, 2, 3, \dots \tag{2.89}$$

$$A^+(x, a_0) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left(\frac{d}{dx} - \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} a_0 \tan x \right) \tag{2.90}$$

$$\Psi_0(x, a_0) = (\sec hx)^{-\left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\right)a_0} \tag{2.91}$$

où $a_0 = \frac{\hbar\lambda}{\sqrt{2m}}; a_1 = a_0 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}$

Pour :

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{+\infty} N_0^2(a_0) \Psi_0^2(x, a_0) dx \\
&= N_0^2(a_0) \frac{\left[2^{\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\right)a_0} \Gamma\left(\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\right)a_0 + 1\right) \right]^2}{\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\right)a_0 \Gamma\left(2\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\right)a_0 + 1\right)} = 1
\end{aligned} \tag{2.92}$$

Le coefficient de la normalisation s'obtient d'après l'utilisation des équations (2.53); (2.89)

$$\begin{aligned}
N_0(a_0) &= \left[\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} a_0 \Gamma \left(2\sqrt{\frac{2m}{\hbar}} a_0 + 1 \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \left[2^{\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\right)a_0} \Gamma \left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} a_0 + 1 \right) \right]^{-1}
\end{aligned} \tag{2.93}$$

et

$$\begin{aligned}
N_1(a_0) &= \left[\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} a_0 - 1 \right) \Gamma \left(\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} a_0 - 1 \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \left[2^{\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\right)a_0} \Gamma \left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} a_0 \right) \left(\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} a_0 - 1 \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{-1}
\end{aligned} \tag{2.94}$$

en plus

$$\begin{aligned}
N_2(a_0) &= \left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \right) \left[\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} a_0 - 2 \right) \Gamma \left(\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} a_0 - 3 \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \left[2^{\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\right)a_0-2} \left(\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} a_0 - 3 \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{4\hbar}{\sqrt{2m}} \left(a_0 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \right. \\
&\left. \times \Gamma \left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} a_0 - 1 \right) \right]^{-1}
\end{aligned} \tag{2.95}$$

D'après la définition de la fonction gamma $\Gamma(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} t^{x-1} \exp(-t) dt$ et avec les équations (2.6), (2.89) et (2.90). La non normalisation des fonctions d'ondes

$$\Psi_1(x, a_0) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left(2\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} a_0 - 1 \right) (\sec hx)^{\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\right)a_0-1} \tan x \tag{2.96}$$

et

$$\Psi_2(x, a_0) = \left(2\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}a_0 - 3\right) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}a_0 - 2\right) \sec h^{-1}x + \frac{\hbar^2}{2m} \sec hx + \frac{\hbar a_0}{\sqrt{2m}} \tan x \right] (\sec hx)^{\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\right)a_0-2} \tan x \quad (2.97)$$

On utilise les équations (2.90),(2.91)et après une simplification algebrique ,on obtient la normalisation des fonctions d'ondes

$$\Psi_0(x) = \frac{(\lambda\Gamma(2\lambda+1))^{\frac{1}{2}}}{2^\lambda\Gamma(\lambda+1)} \sec h^\lambda x \quad (2.98)$$

avec

$$\Psi_1(x) = \left(\frac{(\lambda+1)\Gamma(2\lambda)}{2^{\lambda-1}\Gamma(\lambda)}\right)^{\frac{1}{2}} \tan x \sec h^{\lambda-1}x \quad (2.99)$$

en plus

$$\Psi_2(x) = \frac{1}{2^\lambda\Gamma(\lambda)} (2(\lambda-2)(2\lambda-2)(2\lambda-3)\Gamma(2\lambda-3))^{\frac{1}{2}} \times [(2\lambda-1)\tan^2 x - 1] \sec h^{\lambda-2}x \quad (2.100)$$

Ces résultats sont les mêmes[49] dans les termes généralisées associées à polynome de Legendre en utilisant la fonction hyperbolique.

2.3.4 potentiel Hulthen :

$$V(r) = -\frac{V_0}{\exp\left(\frac{r}{a}\right) - 1} \quad (2.101)$$

$$V_0, a > 0$$

Le potentiel équivalence :

$$V_l = -\frac{V_0}{\exp\left(\frac{r}{a}\right) - 1} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (2.102)$$

Pour l'état fondamental($l = 0$) on obtient

$$E_{nr}^{(-)}(a_1) + R(a_1) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{a_0 - \beta}{2a_0} \right)^2 - \left(\frac{(n+1)^2 a_1^2 - \beta}{2(n+1)a_1} \right)^2 \right] \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (2.103)$$

et

$$A^+(r, a_0) = -\frac{\hbar}{2m} \left(\frac{d}{dr} + \frac{a_0}{\exp(\alpha r) - 1} + \frac{a_0^2 - \beta}{2a_0} \right) \quad (2.104)$$

avec

$$\chi_0(r, a_0) = (\exp(\alpha r) - 1)^{\frac{a_0}{\alpha}} \exp\left(-\left(\frac{a_0^2 + \beta}{2a_0}\right)r\right) \quad (2.105)$$

ou' : $a_0 = \alpha$, $a_1 = a_0 + \alpha$, $\alpha = \frac{1}{a}$ et $\beta = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$;

$$\chi(r) = rR(r)$$

La condition de normalisation :

$$\int_0^\infty N_0^2(a_0) \left(\frac{\chi_0(r, a_0)}{r} \right)^2 r^2 dr = 1 \quad (2.106)$$

on obtient

$$N_0(a_0) = \sqrt{\alpha} \left[B \left(\frac{\beta}{2a_0} - \frac{a_0}{\alpha}, \frac{2a_0}{\alpha} + 1 \right) \right]^{-1} \quad (2.107)$$

On obtient les coefficients de normalisations :

$$\begin{aligned}
N_1(a_0) &= \sqrt{\alpha} \left[\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} B \left(\frac{\beta}{2a_0} - \frac{a_0}{\alpha} - 1, \frac{2a_0}{\alpha} + 3 \right) \right. \\
&\quad \left. \times \left[\left(\frac{a_0^2 - \beta}{2a_0} \right)^2 - \left(\frac{(a_0 + \alpha)^2 - \beta}{2(a_0 + \alpha)} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right]^{-1}
\end{aligned} \tag{2.108}$$

Avec la relation de recurrence

$$\begin{aligned}
N_2(a_0) &= \sqrt{\alpha} \left[\frac{\hbar^2}{2m} B \left(\frac{\beta}{\alpha a_0 + 2a_0^2} - \frac{a_0}{\alpha} - 2, \frac{2a_0}{\alpha} + 5 \right) \right. \\
&\quad \times \left(\frac{(a_0^2 + \alpha)^2 - \beta}{2a_0 + 2\alpha} \right) - \left[\left(\frac{a_0 + 2\alpha}{2a_0 + 4\alpha} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right]^{-1} \\
&\quad \times \left[\left(\frac{a_0^2 - \beta}{2a_0} \right)^2 - \left(\frac{4(a_0 + \alpha)^2 - \beta}{4(a_0 + \alpha)} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{2.109}$$

On utilise la définition de la fonction Beta

$$B(x, y) = \int_0^\infty \frac{Z^{y-1}}{(1+Z)^{x+y}} dZ \quad x, y > 0$$

La non normalisation des fonctions d'ondes sont obtient à partir des équations (2.17) , (2.104) et(2.105)

$$\begin{aligned}
\chi_1(r, a_0) &= -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[(a_0 + \alpha) \exp(\alpha r) + \left(\frac{a_0^2 - \beta}{2a_0} - \frac{(a_0 + \alpha)^2 + \beta}{2(a_0 + \alpha)} \right) \right. \\
&\quad \left. (\exp(\alpha r) - 1) + a_0 \right] (\exp(\alpha r) - 1)^{\left(\frac{a_0 + \alpha}{\alpha}\right) - 1} \\
&\quad \times \exp \left[-\frac{(a_0 + \alpha)^2 + \beta}{2(a_0 + \alpha)} r \right]
\end{aligned} \tag{2.110}$$

et

$$\begin{aligned}
\chi_2(r, a_0) &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{2a_0 + \alpha}{\exp(\alpha r) + 1} + \frac{a_0^2 - \beta}{2a_0} - \frac{(a_0 + 2\alpha)^2 + \beta}{2(a_0 + 2\alpha)} \right] \\
&\times \left[(a_0 + 2\alpha) \exp(\alpha r) + \left(\frac{(a_0 + \alpha)^2 - \beta}{2(a_0 + \alpha)} - \frac{(a_0 + 2\alpha)^2 + \beta}{2(a_0 + 2\alpha)} \right) \right. \\
&\times (\exp(\alpha r) - 1) + a_0 + \alpha \left. \right] \\
&\times (\exp(\alpha r) - 1)^{\left(\frac{a_0 + \alpha}{\alpha}\right) + 1} \exp \left[-\frac{(a_0 + 2\alpha)^2 + \beta}{2(a_0 + 2\alpha)} r \right] \\
&+ \frac{\hbar^2}{2m} \left[(a_0 + 2\alpha) \exp(\alpha r) + \left(\frac{(a_0 + \alpha)^2 - \beta}{2(a_0 + \alpha)} - \frac{(a_0 + 2\alpha)^2 + \beta}{2(a_0 + 2\alpha)} \right) \right. \\
&\times \exp(\alpha r) - 1 \left. \right] (\exp(\alpha r) - 1)^{\frac{a_0 + 1}{\alpha}} \exp \left[-\frac{(a_0 + 2\alpha)^2 + \beta}{2(a_0 + 2\alpha)} r \right] \quad (2.111)
\end{aligned}$$

La normalisation des fonctions d'ondes

$$R_{1,0}(r) = \frac{\sqrt{\alpha}}{B\left(\left(\frac{\beta}{\alpha^2}\right) - 1, 3\right)} \frac{\exp(\alpha r) - 1}{r} \exp\left(\left(\frac{\alpha^2 + \beta}{2\alpha}\right) r\right) \quad (2.112)$$

$$\begin{aligned}
R_{2,0}(r) &= \sqrt{\alpha} \left[\frac{3}{2}\alpha \exp(\alpha r) + \frac{3}{2}\alpha + \frac{\beta}{4\alpha} \exp(\alpha r) \right] \\
&\times \left[B\left(\frac{\beta}{2\alpha^2} - 2, 5\right) \left[\left(\frac{\alpha}{2} - \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2 - \left(\alpha - \frac{\beta}{4\alpha}\right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right]^{-1} \times \frac{\exp(\alpha r) - 1}{r} \\
&\times \exp - \left(\frac{4\alpha^2 + \beta}{4\alpha} \right) r \quad (2.113)
\end{aligned}$$

$$R_{3,0}(r) = \sqrt{\alpha} \left[rB \left(\frac{\beta}{3\alpha^2} - 3, 7 \right) \left[\left(\frac{4\alpha^2 - \beta}{4\alpha} \right)^2 - \left(\frac{9\alpha^2 - \beta}{6\alpha} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right. \quad (2.114)$$

$$\left. \left[\left(\frac{\alpha^2 - \beta}{2\alpha} \right)^2 - \left(\frac{16\alpha^2 - \beta}{8} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right]^{-1} \quad (2.115)$$

$$\times \left[\left(\frac{3\alpha}{\exp(\alpha r) - 1} - \frac{2\beta}{3\alpha} - \alpha \right) \begin{pmatrix} 3\alpha \exp(\alpha r) - \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{5\beta}{12\alpha} \right) \\ (\exp(\alpha r) - 1) + 2\alpha \end{pmatrix} \right. \\ \left. 3\alpha^2 \exp(\alpha r) - \left(\frac{\alpha^2}{2} + \frac{5\beta}{12} \right) (\exp(\alpha r) - 1)^2 \exp - \left(\frac{9\alpha^2 + \beta}{6\alpha} \right) r \right] \quad (2.116)$$

2.4 Propriétés thermodynamiques

2.4.1 Potentiel de Morse

Pour le e potentiel de Morse, l'énergie est donnée

$$\begin{aligned} E_n^{(-)}(a_1) + R(a_1) &= -\frac{\hbar^2}{2m} [a_0^2 - (a + n\alpha + \alpha)^2] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} [a_0^2 - a_0^2 - 2a_0^2\alpha(n+1) - \alpha^2(n+1)^2] \end{aligned} \quad (2.117)$$

En pose le changement de variable suivant $n + 1 = \rho$,

$$E_n^{(-)}(a_1) + R(a_1) = -\frac{\hbar^2}{2m} [2a_0\rho + \alpha\rho^2] \quad (2.118)$$

alors

$$Z(\beta) = \int d\rho \exp \left(\beta \frac{\hbar^2}{2m} (2a_0\rho + \alpha\rho^2) \right) \quad (2.119)$$

on pose : $\beta \frac{\hbar^2}{2m} \alpha = \sigma$, $\beta \frac{\hbar^2}{2m} 2a_0 = \gamma$

l'eqt(2.119) devient

$$Z(\beta) = \int d\rho \exp(\sigma\rho^2 + \gamma\rho) \quad (2.120)$$

$$= \int d\rho \exp\left(\sigma\left(\rho^2 + \frac{\gamma}{\sigma}\rho\right)\right) \quad (2.121)$$

$$= \int d\rho \exp\left(\sigma\left(\rho^2 + \frac{2\gamma}{2\sigma}\rho + \frac{\gamma^2}{4\sigma^2} - \frac{\gamma^2}{4\sigma^2}\right)\right) \quad (2.122)$$

$$= \int d\rho \exp\left(\sigma\left(\rho + \frac{\gamma}{2\sigma}\right)^2 - \frac{\gamma^2}{4\sigma^2}\right) \quad (2.123)$$

$$= \exp\left(-\frac{\gamma^2}{4\sigma^2}\right) \int d\rho \exp\left(\sigma\left(\rho + \frac{\gamma}{2\sigma}\right)^2\right) \quad (2.124)$$

$$= \exp\left(-\frac{\gamma^2}{4\sigma^2}\right) \sqrt{-\frac{\pi}{\sigma}} \quad (2.125)$$

donc

$$Z(\beta) = \exp\left(-\frac{\gamma^2}{4\sigma^2}\right) \sqrt{-\frac{2m\pi}{\hbar^2\beta\alpha}} \quad (2.126)$$

L'énergie interne

$$U(\beta, \sigma) = -\frac{\hbar^2 a_0^2}{2m\alpha} + \frac{2m\pi}{\hbar^2\beta^2\alpha} \quad (2.127)$$

L'énergie libre

$$F(\beta) = -kT \ln Z \quad (2.128)$$

$$F(\beta) = -kT \left[\frac{\hbar^2}{2m} \beta \frac{a_0^2}{\alpha} \ln \sqrt{\frac{-m\pi}{\hbar^2\beta\alpha}} \right] \quad (2.129)$$

$$F(\beta) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{a_0^2}{\alpha} - \sqrt{\frac{kT 2m\pi}{\hbar^2}} \quad (2.130)$$

La chaleur spécifique

$$C(\beta) = -\frac{\partial U}{\partial \beta} \quad (2.131)$$

$$U(\beta) = -\frac{\hbar^2 a_0^2}{2m\alpha} + \frac{2m\pi}{\hbar^2 \beta^2 \alpha} \quad (2.132)$$

$$C(\beta) = -\frac{4m\pi}{\hbar^2 \beta^3 \alpha^2} \quad (2.133)$$

2.4.2 Le potentiel de Poschell-Teller modifié

$$\begin{aligned} E_n^{(-)}(a_1) + R(a_1) &= \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}}(n+1)a_1 - \frac{\hbar^2}{2m}(n^2-1) \\ &= 2a_1 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}(n-1) \end{aligned} \quad (2.134)$$

On pose $(n-1) = \rho$

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \int \exp\left(-\beta\left(2a_1 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\rho\right)\right) d\rho \\ &= \exp(-2\beta a_1) \int \exp\left(\beta\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\rho\right) d\rho \\ &= \exp(-2\beta a_1) \times \frac{\sqrt{2m}}{\beta\hbar} \times \exp\left(\beta\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\rho\right) \\ &= \frac{\sqrt{2m}}{\beta\hbar} \times \exp\beta\left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\rho - 2a_1\right) \end{aligned} \quad (2.135)$$

$$Z(\beta) = \frac{\sqrt{2m}}{\beta\hbar} \times \exp\beta\left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\rho - 2a_1\right) \quad (2.136)$$

$$\ln Z(\beta) = \ln \frac{\sqrt{2m}}{\beta \hbar} + \beta \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \rho - 2a_1 \right) \quad (2.137)$$

$$\frac{\partial \ln Z(\beta)}{\partial \beta} = -\frac{1}{\beta} + \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \rho - 2a_1 \right) \quad (2.138)$$

$$U = \frac{1}{\beta} - \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \rho - 2a_1 \right) \quad (2.139)$$

L'énergie libre

$$F = -kT \ln Z \quad (2.140)$$

$$F = -kT \ln \left(\frac{\sqrt{2m}}{\beta \hbar} - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \rho - 2a_1 \right) \quad (2.141)$$

La chaleur leur spécifique C

$$\begin{aligned} C &= \frac{\partial U}{\partial \beta} \\ &= \frac{1}{\beta^2} \end{aligned} \quad (2.142)$$

Chapitre 3

Méthode des iterrations asymptotique (AIM)

3.1 Introduction

L'étude de certains problèmes de la physique quantique est souvent ramenée à la résolution d'équations différentielles linéaires homogènes du second ordre. Cependant, il existe plusieurs techniques qui permettent d'obtenir des solutions exactes pour ces équations. Récemment, une nouvelle approche à été proposée pour résoudre le problème de la propagation de la lumière à travers une dalle inhomogène à une dimension. Il s'agit de la méthode des itérations asymptotiques [22, 23, 24]. Dans la section suivante nous allons présenter un rappel succinct de cette méthode.

3.2 Méthode des itérations asymptotiques (AIM)

La méthode des itérations asymptotiques (AIM) est proposée pour obtenir des solutions exactes des équations de second ordre ayant la forme

$$Y''(x) - \lambda_0(x) Y'(x) - s_0(x) Y(x) = 0, \quad (3.1)$$

où $\lambda_0(x) \neq 0$ et $s_0(x)$ sont les coefficients de l'équation différentielle et sont des fonctions définies et supposées suffisamment différentiables.

Dans le but d'obtenir une solution générale de l'équation différentielle, la méthode consiste d'abord en la dérivée par rapport à x de l'équation (3.1), nous obtenons ainsi

$$Y'''(x) - \lambda_1(x) Y'(x) - s_1(x) Y(x) = 0, \quad (3.2)$$

avec les nouveaux coefficients $\lambda_1(x) = \lambda'_0 + \lambda_0^2 + s_0$ et $s_1(x) = s'_0 + s_0\lambda_0$ exprimés en terme des anciens coefficients.

Nous poursuivons avec la dérivée de l'équation (3.2), ce qui donne

$$Y''''(x) - \lambda_2(x) Y'(x) - s_2(x) Y(x) = 0, \quad (3.3)$$

où $\lambda_2(x) = \lambda'_1 + \lambda_1\lambda_0 + s_1$ et $s_2(x) = s'_1 + s_0\lambda_1$.

En prenant la $k^{\text{ième}}$ dérivée de l'équation (3.1), nous obtenons finalement l'équation suivante

$$Y^{(k)}(x) - \lambda_{k-2}(x) Y'(x) - s_{k-2}(x) Y(x) = 0, \quad (3.4)$$

où les coefficients de l'équation différentielle sont donnés par les relations de récurrence suivantes

$$\begin{aligned} \lambda_k(x) &= \lambda'_{k-1} + \lambda_{k-1}\lambda_0 + s_{k-1}, \\ s_k(x) &= s'_{k-1} + s_0\lambda_{k-1}, \\ k &= 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.5)$$

Par conséquent, et à partir de l'équation (3.4), nous obtenons la relation suivante

$$\frac{Y^{(k+2)}(x)}{Y^{(k+1)}(x)} = \frac{\lambda_k \left[Y'(x) + \frac{s_k}{\lambda_k} Y(x) \right]}{\lambda_{k-1} \left[Y'(x) + \frac{s_{k-1}}{\lambda_{k-1}}(x) Y(x) \right]}. \quad (3.6)$$

En introduisant maintenant l'aspect asymptotique de la méthode d'itération pour une valeur suffisamment grande de k , l'équation (3.6) se réduit à la nouvelle équation

$$\frac{Y^{(k+2)}(x)}{Y^{(k+1)}(x)} = \frac{\lambda_k}{\lambda_{k-1}}. \quad (3.7)$$

Par l'intégration de cette équation, nous écrivons

$$Y^{(k+1)}(x) = C \exp \left\{ \int \frac{\lambda_k(x)}{\lambda_{k-1}(x)} dx \right\}, \quad (3.8)$$

où C représente la constante d'intégration.

En utilisant les relations (3.5) et l'aspect asymptotique (3.7), l'équation (3.8) prend la nouvelle forme

$$Y^{(k+1)}(x) = C \lambda_{k-1}(x) \exp \left\{ \int [\alpha(x) + \lambda_0(x)] dx \right\}. \quad (3.9)$$

La substitution de (3.9) dans (3.4) conduit à l'équation différentielle du premier ordre

$$Y'(x) + \alpha Y(x) - C \exp \left\{ \int [\alpha(x) + \lambda_0(x)] dx \right\} = 0 \quad (3.10)$$

dont la solution générale est

$$Y(x) = e^{-\int \alpha(x) dx} \left[C' + C \int e^{\int [2\alpha(x) + \lambda_0(x)] dx} dx \right], \quad (3.11)$$

où C' est la nouvelle constante de normalisation.

Enfin, les valeurs de l'énergie sont obtenues à partir des racines de l'équation

$$\lambda_k(x) s_{k-1}(x) - \lambda_{k-1}(x) s_k(x) = 0, \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (3.12)$$

3.3 Equation de Schrödinger pour une particule soumise à un potentiel hyperbolique déformé

L'équation de Schrödinger est l'une des équations de la physique quantique dont la solution peut facilement être obtenue par la méthode des itérations asymptotiques. Dans cette section et pour mettre en oeuvre la méthode des itérations asymptotiques, nous considérons un système quantique constitué d'une particule non relativiste soumise à un potentiel hyperbolique déformé donné par l'expression

$$V(x) = V_0 \frac{\tanh_q(\alpha x) + \gamma}{\cosh_q^2(\alpha x)}, \quad (3.13)$$

où V_0 , α et γ sont des constantes positives et q un paramètre de déformation.

L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension relative à ce système s'écrit

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left[V_0 \frac{\tanh_q(\alpha x) + \gamma}{\cosh_q^2(\alpha x)} - E \right] \psi(x) = 0. \quad (3.14)$$

Pour pouvoir appliquer la méthode des itérations asymptotiques à ce problème, nous procédons au changement de variables

on pose

$$r = \tanh_q(\alpha x) \quad (3.15)$$

avec

$$\cosh_q^2(\alpha x) = \frac{1}{(1-r^2)} \quad (3.16)$$

$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{dr} \frac{dr}{dx} \quad (3.17)$$

et

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = \frac{d\Psi}{dr} \frac{dr}{dx} \quad (3.18)$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{d\Psi}{dr} \frac{dr}{dx} \right) \quad (3.19)$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = \frac{d^2\Psi(r)}{dr^2} \left(\frac{dr}{dx} \right)^2 + \frac{d\Psi}{dr} \frac{d^2r}{dx^2} \quad (3.20)$$

$$r = \frac{\sinh_q(\alpha x)}{\cosh_q(\alpha x)} \quad (3.21)$$

$$dr = \frac{\alpha (\cosh_q^2(\alpha x) - \sinh_q^2(\alpha x))}{\cosh_q^2(\alpha x)} dx \quad (3.22)$$

$$dr = (1 - \tanh_q^2(\alpha x)) dx \quad (3.23)$$

donc

$$\frac{dr}{dx} = \alpha (1 - r^2) \quad (3.24)$$

et

$$\left(\frac{dr}{dx} \right)^2 = \alpha^2 (1 - r^2)^2 \quad (3.25)$$

donc

$$d^2r = -2\alpha^2 (1 - \tanh_q^2(\alpha x)) \tanh_q(\alpha x) d^2x \quad (3.26)$$

$$\frac{d^2r}{d^2x} = -2\alpha^2 r (1 - r^2) \quad (3.27)$$

on obtient

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2\Psi(r)}{dr^2} \alpha^2 (1 - r^2)^2 + \frac{d\Psi}{dr} (-2\alpha^2 r (1 - r^2)) \right] + [V_0(r + \gamma) (1 - r^2) - E] \Psi(r) = 0 \quad (3.28)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(r)}{dr^2} \alpha^2 (1 - r^2)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d\Psi}{dr} 2\alpha^2 r (1 - r^2) - [V_0(r + \gamma) (1 - r^2) - E] \Psi(r) \quad (3.29)$$

$$\text{avec } (1 - r^2)^2 = ((1 - r)(1 + r))^2 = (1 - r)^2 (1 + r)^2$$

donc

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi(r)}{dr^2} &= \frac{2}{(1-r)^2(1+r)^2} (r-r^3) \\ &+ \frac{2m}{\alpha^2\hbar^2(1-r)^2(1+r)^2} (V_0r - V_0r^3 + V_0\gamma - V_0\gamma r^2 - E) \Psi(r) \end{aligned} \quad (3.30)$$

qui permet d'éliminer les fonctions hyperboliques déformés de l'équation de Schrödinger et ainsi obtenir une forme similaire au type d'équations auquel la méthode (AIM) est applicable.

Ceci conduit à la nouvelle équation

$$\frac{d^2\psi(r)}{dr^2} = \lambda_0(r) \frac{d\psi(r)}{dr} + s_0(r) \psi(r), \quad (3.31)$$

où $\lambda_0(r)$ et $s_0(r)$ sont donnés par les expressions

$$\lambda_0(r) = \frac{2}{(r+1)^2(r-1)^2} (r-r^3) \quad (3.32)$$

et

$$s_0(r) = \frac{2m}{\alpha^2\hbar^2(r+1)^2(r-1)^2} (V_0r - V_0\gamma r^2 - V_0r^3 + V_0\gamma - E). \quad (3.33)$$

Le spectre de l'énergie est obtenu en calculant les racines de l'équation

$$\lambda_{k-1}(r) s_k(r) - \lambda_k(r) s_{k-1}(r) = 0. \quad (3.34)$$

$$\psi''(r) = \lambda_0\psi'(r) + S_0\psi(r) \quad (3.35)$$

où $\lambda_0(r)$ et $S_0(r)$ sont donnés par les expressions

$$\lambda_0(r) = \frac{2}{(r+1)^2(r-1)^2} (r-r^3) \quad (3.36)$$

et

$$S_0(r) = \frac{2}{\alpha^2 \hbar^2 (r+1)^2 (r-1)^2} (V_0 r - V_0 \gamma r^2 - V_0 r^3 + V_0 \gamma - E) \quad (3.37)$$

avec $(r+1)^2 (r-1)^2 = (r^2-1)^2$ et $(r-r^3) = -r(r^2-1)$

dérivée l'équation (3.35) nous trouvons

$$\psi'''(r) = \lambda_1 \psi'(r) + S_1 \psi(r) \quad (3.38)$$

avec $\lambda_1 = \lambda_0' + \lambda_0^2 + S_0$ et $S_1 = S_0 \lambda_0 + S_0'$

où $\lambda_1(r)$ et $S_1(r)$ sont donnés par les expressions

$$\lambda_1(r) = \frac{2}{(r^2-1)^2} \left[(r^2+1) + 2r^2 + \frac{1}{\alpha^2 \hbar^2} (V_0 r - V_0 \gamma r^2 - V_0 r^3 + V_0 \gamma - E) \right] \quad (3.39)$$

on pose $\beta = (V_0 r - V_0 \gamma r^2 - V_0 r^3 + V_0 \gamma - E)$

donc

$$\lambda_1(r) = \frac{2}{(r^2-1)^2} \left[(r^2+1) + 2r^2 + \frac{1}{\alpha^2 \hbar^2} \beta \right] \quad (3.40)$$

et

$$S_1(r) = -\frac{1}{\alpha^2 \hbar^2 (r^2-1)^2} \left[(5V_0 r^4 - 4V_0 \gamma r^3 - 3V_0 \gamma r^2 + 2V_0 - Er) + \frac{4r}{(r^2-1)} (V_0 r - V_0 \gamma r^2 - V_0 r^3 + V_0 \gamma - E) \right] \quad (3.41)$$

on pose $\delta = (5V_0 r^4 - 4V_0 \gamma r^3 - 3V_0 \gamma r^2 + 2V_0 - Er)$

et $\beta = (V_0 r - V_0 \gamma r^2 - V_0 r^3 + V_0 \gamma - E)$

donc

$$S_1(r) = -\frac{1}{\alpha^2 \hbar^2 (r^2-1)^2} \left[\delta + \frac{4r}{(r^2-1)} \beta \right] \quad (3.42)$$

Calculer l'énergie

$$\lambda_1(r) S_0(r) - \lambda_0(r) S_1(r) = 0 \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned} 0 = & \frac{2}{(r^2 - 1)^2} \left[(r^2 + 1) + 2r^2 + \frac{1}{\alpha^2 \hbar^2} \beta \right] \\ & \times \left(\frac{2}{\alpha^2 \hbar^2 (r^2 - 1)^2} \beta \right) - \frac{2}{(r^2 - 1)^2} (r - r^3) \\ & \times \left(-\frac{1}{\alpha^2 \hbar^2 (r^2 - 1)^2} \left[\delta + \frac{4r}{(r^2 - 1)} \beta \right] \right) \end{aligned} \quad (3.44)$$

donc

$$\frac{2}{\alpha^2 \hbar^2 (r^2 - 1)^4} \left[\beta \left(2(r^2 + 1) + 4r^2 + \frac{2}{\alpha^2 \hbar^2} \beta \right) + \left\{ (r - r^3) \times \left(\delta + \frac{4r}{(r^2 - 1)} \beta \right) \right\} \right] = 0 \quad (3.45)$$

A ce niveau il est important de noter qu'à chaque itération, l'équation (3.34) qui donne les énergies E_n dépendra de E et de r . C'est pourquoi toutes valeurs de r racines de l'équation (3.34) qui donne un spectre divergent sont à écarter.

3.4 Equation de Schrödinger pour une particule dans un potentiel diatomique déformé

Dans cette section, nous proposons de l'équation de Schrödinger relative à un système quantique constitué d'une particule soumise à un potentiel diatomique déformé[26, 27].

Il s'écrit sous la forme

$$V_q(r) = -\frac{\alpha \exp\left(-\frac{r}{a}\right)}{1 - q \exp\left(-\frac{r}{a}\right)} + \frac{\beta \exp\left(-\frac{r}{a}\right)}{\left(1 - q \exp\left(-\frac{r}{a}\right)\right)^2}, \quad (3.46)$$

où α et β sont des constantes positives, a la portée du potentiel et q un paramètre de déformation..

La partie radiale de l'équation de Schrödinger pour ce potentiel dans le système d'unité $\hbar = \mu = 1$ prend la forme

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + 2 [E_{nl} - V_{eff}] R_{nl}(r) = 0, \quad (3.47)$$

où le potentiel efficace V_{eff} est donné par

$$V_{eff}(r) = -\frac{\alpha \exp\left(-\frac{r}{a}\right)}{1 - q \exp\left(-\frac{r}{a}\right)} + \frac{\beta \exp\left(-\frac{r}{a}\right)}{\left(1 - q \exp\left(-\frac{r}{a}\right)\right)^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad (3.48)$$

où l est le nombre quantique orbitale.

Pour contourner la difficulté que présente le terme centrifuge, et pour donner une solution analytique pour n'importe quelle valeur de l , nous utilisons l'approximation

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{1}{a^2} \frac{q^2 \exp\left(-\frac{r}{a}\right)}{\left(1 - q \exp\left(-\frac{r}{a}\right)\right)^2}. \quad (3.49)$$

Maintenant, pour ramener l'équation (3.47) au type d'équation donnée par (3.1), nous posons le changement de variable

$$y = \frac{1}{\exp\left(-\frac{r}{a}\right) - q} \quad (3.50)$$

et on définit ainsi la nouvelle dérivée

$$\frac{d^2}{dr^2} = \frac{y^2 (1 + y^2)}{a^2} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{y (1 + y) (1 + 2y)}{a^2} \frac{d}{dy}. \quad (3.51)$$

En utilisant les quatre dernières équations, nous obtenons la l'équation

$$(1 + y^2) y^2 \frac{d^2 R_{nl}(y)}{dy^2} + y (1 + y) (1 + 2y) \frac{dR_{nl}(y)}{dy} + (A + By + Ly^2) R_{nl}(y) = 0, \quad (3.52)$$

où nous avons introduit les nouvelles constantes

$$\begin{aligned}A &= 2a^2 (E - \alpha), \\B &= L - 2\alpha a^2, \\L &= -2\beta a^2 - l(l + 1).\end{aligned}\tag{3.53}$$

Enfin, en posant

$$\lambda_0(y) = \frac{y(1+y)(1+2y)}{(1+y^2)y^2},\tag{3.54}$$

et

$$s_0(y) = \frac{(A + By + Ly^2)}{(1+y^2)y^2}\tag{3.55}$$

nous obtenons la forme de l'équations (3.1).

Chapitre 4

Particule de Klein-Gordon dans des potentiels vecteur et scalaire de Hulthén modifié

4.1 Introduction

Dans la physique de nucléaire et la physique des hautes énergies, l'un des problèmes intéressants est d'obtenir une solution exacte des équations de Klein-Gordon[38], de Duffin-Kemmer-Petiau [41] et de Dirac[42] pour n'importe quel système en interaction. La solution exacte de l'équation d'onde est très importante car la fonction d'onde contient toutes les informations nécessaires concernant le système quantique à l'étude. Il convient de mentionner que la plupart des contributions figurant dans la littérature sont concernées par les états s . Toutefois, pour les états l , on peut seulement résoudre en utilisant une approximation du terme centrifuge. Un certain nombre de méthodes ont été utilisées pour résoudre les équations d'onde exactement ou quasi exactement pour le nombre quantique $l \neq 0$. Lorsqu'une particule se trouve dans un champ de potentiel fort, on doit considérer l'effet relativiste. Récemment, la généralisation des solutions des équations d'ondes relativistes et non relativistes, aussi avec des potentiels différents dans le

cas de la masse constante au cas de la masse dépendant de la position est devenue très attractive. Ces solutions sont très utiles pour étudier les propriétés de certains systèmes physiques dans des nombreux domaines, tels que la physique des semi-conducteurs, les liquides quantiques et la physique de plasmas. En outre, les descriptions des systèmes non relativistes et relativistes de masse dépendante de la position ont récemment reçu beaucoup d'attention aussi. Des nombreux auteurs sont utilisés des différentes méthodes pour résolution des équations de Schrödinger, Klein-Gordon et de Dirac[30, 31], où la résolution est partielle ou exacte, pour différents potentiels où la masse variable ayant une fonction de distributions dans tous les cas de 1,2.. D dimensions, tels que les potentiels de type exponentiel, le potentiel coulombien, les interactions scalaires de Lorentz, les potentiels de type hyperbolique, le potentiel de Morse, le potentiel Poschl-Teller , les potentiels de Coulomb et harmoniques, les potentiels de type Kratzer modifiée et Morse rotationnel corrigée et le potentiel de Mie-type et pseudoharmonic. Aussi l'étude des potentiels de type exponentiel a attiré beaucoup l'attention de nombreux auteurs à la fois en mécanique quantique non relativistes et la mécanique quantique relativiste, comprennent le potentiel Manning-Rosen, le potentiel de type Eckart, de type exponentiel multiparamétriques et d'autres. Le potentiel Hulthén est l'un des potentiels à courte portée qui a été étudié en physique. Ce potentiel a des applications dans différentes branches de la physique comme la physique atomique, nucléaire et de la physique de haute énergie, la physique du solide et chimie physique .Le potentiel Hulthén a été étudié par certains auteurs dans les deux cas de la mécanique quantique non relativistes et relativiste.

Dans ce chapitre, nous tentons de trouver par l'approche des intégrales de chemin les états liés d'un system quantique constitué d'une particule relativiste, sans spin, de charge $(-e)$ et de masse M dépendant de la position, sous l'action d'un champ central représenté par un potentiel vecteur $V_q(r)$ et un potentiel scalaire $S_q(r)$ de Hulthén modifiés.

4.2 Potentiels vecteur et scalaire de Hulthén modifiés

Les potentiels vecteur et scalaire de Hulthén modifiés sont donnés par les expressions :

$$V_q(r) = V_0 - \frac{V_1}{e^{\alpha r} - q}, S_q(r) = S_0 - \frac{S_1}{e^{\alpha r} - q}, \quad (4.1)$$

où V_0, V_1, S_0, S_1 et α sont des constantes réelles et positives et q est un paramètre de déformation qui peut prendre des valeurs réelles quelconques. Lorsque le paramètre de déformation q est négatif, les potentiels (4.1) décrivent une forme générale du potentiel de Hulthén. Ils sont très utiles dans plusieurs branches de la physique. Pour $q = 1$, les potentiels (4.1) se réduisent aux potentiels de Hulthén standard [29], dont la solution, à travers la résolution de l'équation de Klein-Gordon associée aux ondes s [43], dans le même cadre, nous pouvons mentionner également le travail sur le potentiel $S_q(r)$ aussi sur $V_q(r)$ par la méthode de Nikiforov-Ouvarov et dans le cadre des intégrales de chemin [44], a été obtenue depuis longtemps. Dans ces derniers temps, les potentiels(4.1)ont été analysés au moyen de différentes méthodes. Nous pouvons citer, à titre d'exemple, la résolution de l'équation de Duffin-Kemmer-Petiau [41]. De plus, les solutions de l'équation de Klein-Gordon relatives aux états liés avec les potentiels vecteur et scalaire(4.1) ont été obtenues à l'aide de l'approche de la supersymétrie en mécanique quantique et par la méthode d'itération asymptotique, pour les ondes s , c'est à dire, pour le moment angulaire $l = 0$, et en mécanique quantique standard pour les ondes l en utilisant une approximation particulière pour le terme centrifuge .

En revanche, en cas de couplage fort, il est très important de comprendre les effets relativistes sur la masse d'une particule qui se déplaçant dans un champ du potentiel de Hulthén. la résolution du problème de la masse efficace spatialement-dépendante de la position est muni au choix de la variation de la masse, différent formes de la masse ont utilisés avec plusieurs potentiels, dans notre problème en choisissant la fonction de masse suivant la forme dans [38] mais seulement notre distribution est une forme généralisé, car

elle dépend aussi le paramètre de déformation q , et donnée par :

$$M(r) = M_0 + M_1 \frac{e^{-\alpha r}}{1 - qe^{-\alpha r}} \quad (4.2)$$

Dans le paragraphe qui suit, nous allons décrire brièvement l'intégrale de chemin en coordonnées polaires pour la fonction de Green associée à une particule chargée sans spin en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire qui possèdent la symétrie sphérique. Dans le troisième paragraphe, nous présentons l'évaluation de l'intégrale de chemin pour les potentiels de Hulthén généralisés ($q > 0$) en distinguant deux cas : $0 < q < 1$ et $q \geq 1$. Lorsque $q \geq 1$ et $\frac{1}{\alpha} \ln q < r < \infty$, nous montrons que la fonction de Green radiale relative aux potentiels en question pour un état de moment cinétique orbital l se ramène à la fonction de Green pour le potentiel de Rosen-Morse q -déformé en utilisant comme approximation du terme centrifuge $\frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2}$ et en appliquant la technique de transformation spatio-temporelle. L'expression analytique du spectre d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes avec un facteur de normalisation correct pour l quelconque sont obtenues. Pour $0 < q < 1$, la fonction de Green radiale avec $l = 0$ relative aux potentiels (4.1) dans l'intervalle $]0, +\infty[$ est transformé en celle du potentiel de Rosen-Morse q -déformé qui est défini sur la demi-droite $]\frac{1}{2\alpha} \ln(1 - q), +\infty[$. Dans ce cas, nous calculons la fonction de Green en utilisant une perturbation représentée par une fonction δ de Dirac. Les pôles de la fonction de Green donnent une équation transcendante qui permet de connaître les niveaux d'énergie discrets du système physique.

4.3 Construction de l'intégrale de chemin

Considérons la fonction de Green correspondante à l'équation de Klein-Gordon pour le problème d'une particule sans spin sous l'action des potentiels (4.1)

$$[(P - eA)^2 - (S + M)^2]G(x'', x') = \delta^4(x'' - x') \quad (4.3)$$

où $eA = \left(\frac{V_q(r)}{0}\right)$ et M est la masse dépendante de la position (II.2), d'une particule de charge $(-e)$ dans l'espace-temps de Minkowski muni de la métrique $g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$. Pour résoudre ce problème, nous partons de la représentation intégrale de Schwinger[36] qui consiste à écrire formellement la fonction de Green comme suit :

$$G(x''; x') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \langle x'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} [(P - eA)^2 - (S_q + M)^2] \Lambda \right\} | x' \rangle \quad (4.4)$$

Tant que les potentiels (4.1) sont du type Hulthén, nous avons un système à symétrie sphérique qui peut être convenablement décrit en coordonnées polaires. La fonction de Green peut être développée en ondes partielles

$$G(\vec{r}'', t''; \vec{r}', t') = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^\infty \frac{(2l+1)}{4\pi} G_l(r'', t''; r', t') P_l(\cos \Theta) \quad (4.5)$$

où la fonction de Green radiale est donnée par

$$G_l(r'', t''; r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} \left[-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - (S_q + M)^2 \right] \Lambda \right\} | r', t' \rangle \quad (4.6)$$

et $P_l(\cos \Theta)$ est un polynôme de Legendre de degré l en $\cos \Theta$ avec $\cos \Theta = \cos \theta'' \cos \theta' + \sin \theta'' \sin \theta' \cos(\varphi'' - \varphi')$. Suivant la référence [32], nous pouvons exprimer comme une intégrale de chemin sous la forme discrète par rapport au pseudo-temps s' ,

$$G_l(r'', t''; r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty ds' P_l(r'', t''; r', t') \quad (4.7)$$

où le propagateur transformé est donné sous la forme canonique compacte par

$$\begin{aligned}
P_l(r'', t''; r', t'; s') &= f_R(r'') f_L(r') \\
&\times \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} s' f_L(r) \left[-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{l(l+1)}{r^2} - (S_q + M)^2 \right] f_R(r) \right\} | r', t' \rangle \\
&= f_R(r'') f_L(r') \int Dr(s') Dt(s') \int \frac{DP_r(s') DP_0(s')}{(2\pi)^2} \\
&\times \exp \left\{ i \int_0^{s'} \left[-P_r \dot{r} + P_0 t \frac{1}{2} f_L(r) \times \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left(-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - (S_q + M)^2 \right) f_R(r) \right] ds' \right\} \quad (4.8)
\end{aligned}$$

sous forme discrète, il s'écrit

$$\begin{aligned}
P_l(r'', t''; r', t'; s') &= f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^\infty r_j dt_j \right] \\
&\times \left[\prod_{j=1}^{N+1} \frac{d(P_r)_j d(P_0)_j}{(2\pi)^2} \right] \exp \sum_{j=1}^{N+1} A_1^j \quad (4.9)
\end{aligned}$$

dans lequel nous avons introduit les fonctions régulatrices $f_R(r)$ et $f_L(r)$ définies par Kleinert [32] :

$$f(r) = f_R(r) f_L(r) = f^{1-\lambda}(r) f^\lambda(r) \quad (4.10)$$

où λ est le paramètre de dédoublement. L'intégrale de chemin (4.8) comprend l'action élémentaire

$$A_1^j = -(P_r)_j \Delta r_j + (P_0)_j \Delta t_j + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_j) \times \left[-(P_r)_j^2 \Delta r_j + \left((P_0)_j - V_q(r_j) \right)^2 - \frac{l(l+1)}{r_j^2} - (S_q(r_j) + M(r_j))^2 \right] f_R(r_{j-1}) \quad (4.11)$$

avec

$$\varepsilon_{s'} = \frac{s'}{N+1} = ds' = \frac{d\tau}{f_L(r_j) f_R(r_{j-1})}, \quad d\tau = \varepsilon_\tau = \frac{\Lambda}{N+1} \quad (4.12)$$

Remarquons d'abord que les intégrations sur les variables t_j dans l'expression (4.8) produisent N distributions de Dirac $\delta\left((P_0)_j - (P_0)_{j+1}\right)$. Par la suite, après intégration sur les $(P_0)_j$ nous trouvons

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \dots = (P_0)_{N+1} = E \quad (4.13)$$

L'intégrale de chemin représentée par le propagateur $P_l(r'', t''; r', t'; \lambda)$ se réécrit alors

$$P_l(r'', t''; r', t'; s') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp[iE(t'' - t')] P_l(r'', r'; s') \quad (4.14)$$

où le noyau est donné par

$$P_l(r'', r'; s') = f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^\infty r_j \right] \times \left[\prod_{j=1}^{N+1} \frac{d(P_r)_j}{(2\pi)} \right] \exp \sum_{j=1}^{N+1} A_2^j \quad (4.15)$$

avec l'action élémentaire

$$A_2^j = -(P_r)_j \Delta r_j + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_j) \times \left[-(P_r)_j^2 \Delta r_j + (E - V_q(r_j))^2 - \frac{l(l+1)}{r_j^2} - (S_q(r_j) + M(r_j))^2 \right] f_R(r_{j-1}) \quad (4.16)$$

En substituant (4.13) dans (4.16), nous remarquons que le terme dépendant du temps t ne contient pas la variable pseudo-temporelle s' . Donc, nous pouvons réécrire la fonction de Green partielle (4.7) sous la forme

$$G_l(r'', t''; r', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp [iE (t'' - t')] G_l(r'', r') \quad (4.17)$$

où

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} ds' P_l(r'', r'; s') \quad (4.18)$$

Afin de simplifier le calcul du noyau $P_l(r'', r'; s')$, posons le paramètre de dédoublement $\lambda = 1$, c'est à dire, nous choisissons un développement de l'action et de la mesure autour du point moyen puisque le résultat final ne dépend d'aucun point [32]. Alors, en intégrant par rapport aux variables $(P_r)_j$, nous obtenons

$$\begin{aligned} P_l(r'', r'; s') &= \frac{|f(r'')f(r')|^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}}} \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^{\infty} \frac{dr_j}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'} f(r_j)}} \right] \\ &\times \exp \left\{ i \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta r_j)^2}{2\varepsilon_{s'} \sqrt{f(r_j)f(r_{j-1})}} + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} \left(\left(E - V_0 + \frac{V_1}{e^{\alpha r} - q} \right)^2 + \frac{l(l+1)}{r_j^2} \right. \right. \right. \\ &\left. \left. \left. - \left(S_0 - \frac{S_1}{e^{\alpha r} - q} + M_0 + \frac{M_1}{e^{\alpha r} - q} \right)^2 \right) \sqrt{f(r_j)f(r_{j-1})} \right] \right\} \quad (4.19) \end{aligned}$$

Cette intégrale de chemin (4.18) dépend du paramètre réel arbitraire de déformation q et ne peut pas être évaluée exactement à cause de la présence d'un terme centrifuge dans l'expression de l'action lorsque nous nous intéressons à l'étude des ondes l . Cependant, il a été montré[44] que l'expression $\frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2}$ peut être employée comme une très bonne approximation du terme $\frac{1}{r^2}$ centrifuge lorsque le paramètre $q \geq 1$ et $\alpha r \ll 1$. Nous allons aborder dans ce qui suit le calcul de la fonction de Green (4.17) en distinguant deux cas.

4.4 Validité de l'approximation du terme centrifuge :

Examinons maintenant la condition de validité de cette approximation. pour $q > 0$, on réécrit

$$\frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} \quad (4.20)$$

sous la forme

$$\frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} = \frac{\alpha^2}{4 \sinh^2 \left[\frac{\alpha}{2} \left(r - \frac{1}{\alpha} \ln q \right) \right]} \quad (4.21)$$

et pour $\alpha r - \ln q \ll 1$, on a

$$\frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} \approx \frac{1}{\left(r - \frac{1}{\alpha} \ln q \right)^2} - \frac{\alpha}{12} \xrightarrow[r \rightarrow \frac{1}{\alpha} \ln q]{\infty} \text{lorsque } q \geq 1 \quad (4.22)$$

Dans le cas contraire où $q < 0$, on peut réécrire

$$\frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} = \frac{\alpha^2}{4 \cosh^2 \left[\frac{\alpha}{2} \left(r + \frac{1}{\alpha} \ln(-q) \right) \right]} \quad (4.23)$$

et si on suppose $\alpha r + \ln(-q) \ll 1$, on obtient

$$\frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} \approx \frac{\alpha}{4} \left[1 + \frac{1}{4} (\alpha r + \ln(-q))^2 \right] \quad (4.24)$$

A partir des équations (4.22) et (4.24), on voit clairement que l'approximation (4.20) peut être appliquée uniquement dans le cas où $q \geq 1$

4.5 Fonction de Green et équation du spectre de l'énergie

Lorsque le paramètre de déformation q est positif, les potentiels (4.1) représentent des formes modifiées du potentiel de Hulthén [29]. Si $0 < q < 1$, la masse variable(4.2) et les potentiels (4.1) sont continus sur tout l'intervalle R^+ mais, si $q \geq 1$, ils ont une forte singularité au point $r = r_0 = \frac{1}{\alpha} \ln(q)$, créant une barrière impénétrable, et dans ce cas, nous avons deux régions distinctes, l'une est définie par l'intervalle $]0, r_0[$ et l'autre par l'intervalle $]r_0, +\infty[$. Ceci nous conduit à construire la fonction de Green radiale (4.17) par l'intégrale des chemins dans chaque cas. Dans ce travail, nous nous limitons au cas $q \geq 1$ et $r_0 < r < +\infty$.

Afin de construire l'intégrale de chemin pour un état de moment cinétique orbital l , nous remplaçons d'abord $\frac{1}{r^2}$ par $\frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2}$ comme une approximation du facteur contenu dans le terme centrifuge et nous effectuons ensuite la transformation spatiale $r \in]r_0, +\infty[\rightarrow \xi \in]-\infty, +\infty[$ définie par

$$r = \frac{1}{\alpha} \ln [\exp(2\alpha\xi) + q] \quad (4.25)$$

accompagnée de la fonction régulatrice appropriée

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\alpha\xi)}{\cosh_q^2(\alpha\xi)} = g'^2(\xi); \quad (4.26)$$

et sous ces transformations, le noyau (4.18) devient

$$\begin{aligned}
P(r'', r'; s') &= \frac{\exp\left[\frac{\alpha}{2}(\xi'' + \xi')\right]}{[\cosh_q(\alpha\xi'') \cosh_q(\alpha\xi')]^{N \rightarrow \infty}} \prod_{j=1}^N \left[\frac{1}{2i\pi\epsilon_{s'}}\right]^{\frac{1}{2}} \left[\prod_{j=1}^N \int d\xi_j\right] \\
&\times \exp\left\{i \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta\xi_j)^2}{2\epsilon_{s'}} + \frac{1}{8\epsilon_{s'}} \left[\left(\frac{g''}{g'}\right)^2 - \frac{2g'''}{3g'}\right] (\Delta\xi_j)^4\right.\right. \\
&+ \frac{\epsilon_{s'}\alpha^2}{2} \left(\frac{\nu^2}{q^2} + q\mu^2 + \beta^2\right) \frac{1}{\cosh_q^2(\alpha\xi_j)} - \epsilon_{s'}\alpha^2 \left(\frac{\nu^2}{q^2} + \mu^2 + l(l+1)\right) \\
&\left.\left. \left(\frac{\nu^2}{q^2} - \mu^2 + l(l+1)\right) \tanh_q(\alpha\xi_j)\right]\right\} \quad (4.27)
\end{aligned}$$

où les paramètres, μ , β et ν sont définis par

$$\begin{aligned}
\mu &= \frac{1}{\alpha} \sqrt{(E - V_0)^2 - (S_0 + M_0)^2}; \nu = \frac{1}{\alpha} \sqrt{V_1^2 - (S_1 - M_1)^2}; \\
\beta &= \frac{1}{\alpha} \sqrt{2V_1(E - V_0) + 2(M_0 + S_0)(M_1 - S_1)}; \quad (4.28)
\end{aligned}$$

Dans les équations (4.26) et (4.27), nous avons utilisé les fonctions hyperboliques déformées introduites pour la première fois par Arai [33]

$$\sinh_q x = \frac{1}{2} (e^x - qe^{-x}), \cosh_q x = \frac{1}{2} (e^x + qe^{-x}), \tanh_q x = \frac{\sinh_q x}{\cosh_q x} \quad (4.29)$$

où q est un paramètre réel.

Notons que le terme en $(\Delta\xi_n)^4$ apparaissant dans l'action contenue dans le noyau (4.27) contribue de façon significative à l'intégrale de chemin. Il peut être estimé en utilisant la théorie des perturbations et remplacé par

$$\langle (\Delta\xi_n)^4 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta\xi_n) (\Delta\xi_n) \left(\frac{1}{2i\pi\epsilon_s}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{i}{2\epsilon_s} (\Delta\xi_n)^2\right] = -3\epsilon_s^2 \cdot 00 \quad (4.30)$$

Le changement de variables $u_n = \alpha \xi_n$ et $\varepsilon_\sigma = \alpha^2 \varepsilon_{s'}$ nous permet de mettre la fonction de Green ,(4.18) pour les états l , sous la forme

$$G_l(r'', r') = -\frac{1}{2a} [f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}} G_{RM}^l(u'', u'; \tilde{E}_l) \quad (4.31)$$

et

$$G_{RM}^l(u'', u'; \tilde{E}_l) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_l \sigma) P_{RM}^l(u'', u'; \sigma) \quad (4.32)$$

avec

$$\tilde{E}_l = -\left(\mu^2 + \frac{\nu^2}{q^2} + l(l+1) + \frac{1}{4}\right) \quad (4.33)$$

et

$$P_{RM}^l(u'', u', \sigma) = \int Du(\tau) \exp\left\{i \int_0^\sigma \left[\frac{\dot{u}^2}{2} - V_{RM(u)}^l\right] d\tau\right\} \quad (4.34)$$

est le propagateur associé au potentiel de Rosen-Morse [28] (ou potentiel de Pöschl-Teller modifié général) défini en termes des fonctions hyperboliques déformées ainsi

$$V_{RM}^l(u) = A_l \tanh q(u) - \frac{B}{\cosh q(u)}; u \in \mathbb{R} \quad (4.35)$$

Ici, nous avons posé

$$\begin{cases} A_l = \mu^2 - \frac{\nu^2}{q^2} - l(l+1) - \frac{1}{4}; \\ B = \frac{1}{2}(q\mu^2 + \frac{\nu^2}{q} + \beta^2 - \frac{q}{4}) \end{cases} \quad (4.36)$$

Puisque la solution exacte de (4.32) est bien connue, nous pouvons donc écrire directement le résultat[46]

$$\begin{aligned}
G_{RM}(u'', u'; E_l) &= \frac{\Gamma(M_1 - l_E)\Gamma(l_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1)\Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left(\frac{1 - \tanh u'}{2}\right)^{\frac{M_1+M_2}{2}} \left(\frac{1 - \tanh u''}{2}\right)^{\frac{M_1+M_2}{2}} \left(\frac{1 + \tanh u'}{2}\right)^{\frac{M_1-M_2}{2}} \left(\frac{1 + \tanh u''}{2}\right)^{\frac{M_1-M_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1\left(-l_E + M_1, l_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1 + \tanh_{|q|} u_{>}}{2}\right) \\
&\times {}_2F_1\left(-l_E + M_1, l_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1 - \tanh_{|q|} u_{<}}{2}\right) \tag{4.37}
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé les abréviations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} l_E = -\frac{1}{2} + \left(\frac{1}{16} + 2E_{PT'}\right)^{\frac{1}{2}}; \\ E_{PT'} = \frac{1}{2}\left(\frac{v^2}{q^2} + \frac{\beta^2}{q} + \mu^2\right) - \frac{1}{32}; \\ M_1 = \mu + \delta_{l_{\pm}} + \frac{1}{2}; M_2 = \mu - \delta_{l_{\pm}} - \frac{1}{2}; \end{array} \right. \tag{4.38}$$

avec

$$\delta_{l_{\pm}} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{v^2}{q^2} + \left(l + \frac{1}{2}\right)} \tag{4.39}$$

Dans la suite, nous devons prendre $\delta_l = \delta_{l_+}$, pour éviter la chute de la particule sur le centre[47]. Compte tenu des relations entre les variables r, ξ et u , la fonction de Green radiale $G_l(r', r_0)$ associée aux potentiels(4.1), pour $q \geq 1$ et dans l'intervalle $]r_0, +\infty[$ est alors donnée par

$$\begin{aligned}
G_l(r'', r') &= -\frac{1}{\alpha} \frac{\Gamma(M_1 - l_E)\Gamma(l_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1)\Gamma(M_1 - M_2 + 1)} (q^2 e^{-\alpha(r'+r'')})^{\frac{M_1+M_2}{2}} \\
&\left[(1 - qe^{-\alpha r''})(1 - qe^{-\alpha r'}) \right]^{\frac{M_1-M_2+1}{2}} \\
&\times {}_2F_1\left(-l_E + M_1, l_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; 1 - qe^{-\alpha r'}\right) \\
&\times {}_2F_1\left(-l_E + M_1, l_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; qe^{-\alpha r''}\right) \tag{4.40}
\end{aligned}$$

le spectre d'énergie s'obtient à partir des pôles de la fonction de Green qui se présentent

lorsque $M_1 - l_E = -n_r$, dans la fonction d'Euler $\Gamma(M_1 - l_E)$ où $n_r = 0, 1, 2, \dots$ Ils sont donnés par l'équation

$$\epsilon_{n_r, l} = \frac{\beta^2 - q [(n_r + 1)^2 + (2n_r + 1) \delta_l + l(l + 1)]}{2q(n_r + \delta_l + 1)}. \quad (4.41)$$

4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons calculé, par les intégrales de chemin, la fonction de green relative à une particule soumise à un potentiel vecteur et un potentiel scalaire de type Hulthén modifiés (potentiels à cinq paramètres) généralisant plusieurs systèmes quantique. Il est très important de comprendre les effets relativistes sur une particule se déplaçant dans un champ de potentiel, en cas de couplage fort. C'est pourquoi nous avons choisi de traiter le problème avec une masse variable et plus précisément une masse dépendant de la position. Cette considération permet une généralisation de l'étude du problème. Ensuite, et pour contourner la difficulté que présente le terme centrifuge, nous avons introduit une approximation qui n'est valable que pour $q \geq 1$. Ceci nous a permis de donner une solution analytique du problème pour n'importe quelle valeur de l . Il faut noter que cette démarche de calcul de la fonction de Green en utilisant l'approximation du terme centrifuge est largement appliquée dans le cas des potentiels centraux.

Chapitre 5

Conclusion générale

Dans ce présent travail, nous avons présenté l'étude de quelques systèmes quantiques relativistes et non relativistes avec des différentes méthodes et formulations. Le choix de la technique à utiliser dans la résolution des équations de la physique quantique est dicté par la nature du système étudié du point de vue interaction, autrement dit, du potentiel auquel est soumis le système en question. Ainsi, dans le cas des potentiels qui se présentent sous une forme mathématique complexe, la technique de la mécanique quantique supersymétrique est plus adaptée car elle permet d'avoir une forme beaucoup plus simple. Quand il s'agit de potentiels qui conduisent à une forme particulière de l'équation différentielle, à savoir une équation linéaire du second ordre dont la solution s'exprime en termes de certains polynômes orthogonaux, la méthode des itérations asymptotiques est plus utilisée. Enfin, la formulation des intégrales de chemin, même si elle peut paraître plus compliquée d'un point de vue mathématique, elle est la plus adaptée à tous les problèmes de la physique quantique à un grand nombre de degrés de liberté car elle permet d'avoir des résultats plus exactes. Dans la première application, nous avons choisi de résoudre l'équation de Schrödinger relative à deux potentiels afin de calculer les fonctions d'onde et le spectre de l'énergie ; il s'agit du potentiel de Morse et du potentiel de Hulthén. Nous avons aussi déterminé quelques propriétés thermodynamiques de ces systèmes. Pour la deuxième application, nous avons choisi de résoudre l'équation de Schrödinger relative

à un potentiel hyperbolique déformé par la méthode des itérations asymptotiques. Les équations qui donnent les fonctions d'onde ainsi que le spectre d'énergie sont obtenues. Enfin, la dernière application concerne l'étude d'une particule relativiste soumise à un potentiel vecteur et un potentiel scalaire à cinq paramètres et avec une masse variable par le formalisme des intégrales de chemin. Il s'agit d'une forme modifiée du potentiel de Hulthén. Dans ce cas, nous sommes contents de donner l'expression de la fonction de Green sous une forme compacte ainsi que l'équation qui donne le spectre

Bibliographie

- [1] Physique quantique et représentation du monde. Edition Seuil 1992.
- [2] L. D. Landau and E. M. Lifchitz, Quantum Mechanics Pergamon, Oxford, 1958 .
- [3] Mécanique quantique, Dunod, 1964 ; dernière réédition 1995.
- [4] Werner Heisenberg, Les principes physiques de la théorie des quanta, Paris, J. Gabay, coll. « Grands classiques Gauthier-Villars ».
- [5] P. A. M. Dirac. The Principles of Quantum Mechanics (International Series of Monographs on Physics) 4th Edition.
- [6] Richard P. Feynman and A. R. Hibbs. Quantum Mechanics and Path Integrals.
- [7] H. Kleinert, Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets, 4th ed. World Scientific, Singapore, 2006 .
- [8] Cüneyt Berkdemir. Application of the Nikiforov-Uvarov Method in Quantum Mechanics. The Pennsylvania State University USA.
- [9] C. M. Bender, and Q. Wang, " A class of exactly-solvable eigenvalue problems", *J. Phys. A*, Vol. 34, 9835, 2001.
- [10] Fred Cooper, Avinash Khare, Uday Sukhatmec. Supersymmetry and quantum mechanics. Physics Reports Volume 251, Issues 5–6, January 1995, Pages 267-385.
- [11] H. Miyazawa, Phys. Rev. 170 (1968)1596.
- [12] Y. A. Gel'fand et E. P. Likhtman, JETF Lett. 13 (1971)323.
- [13] P. Ramond, Phys. Rev. D 3 (1971) 2415.

- [14] A. Neuveu et J. Schwarz, Nucl. Phys. B 31 (1971) 86.
- [15] D. V. Volkov et V. P. Akulov, Phys. Lett. B 44 (1973) 109.
- [16] R. Haag, J. T. Lopuszański et M. Sohnius, Nucl. Phys. B 88 (1975) 257.
- [17] J. Wess et B. Zumino, Nucl. Phys. B 70 (1974) 39.
- [18] J. Wess et B. Zumino, Nucl. Phys. B 78 (1974) 1.
- [19] E. Schrödinger, Proc. R. Irish Acad. A 46 (1940) 9; 46 (1940) 183; 47 (1941) 53.
- [20] E. Witten, Nucl. Phys. B 188 (1981) 513.
- [21] E. Witten, Nucl. Phys. B 202 (1982) 253.
- [22] H. Ciftci, R. L. Hall, and N. Saad, "Asymptotic iteration method for eigenvalue problems", *J. Phys. A : Math. Gen.* Vol. 36, 11807, 2003.
- [23] H. Ciftci, R. L. Hall, and N. Saad, "Perturbation theory in framework of iteration method", *Phys. Lett. A*, Vol. 346, 381, 2005.
- [24] Bayrak. O, and I. Boztosun, "Analytical solution to the Hulthen and Morse potential using the asymptotic iteration method", *J. Mol. Struct. (theochem)*, Vol. 802, 17, 2007.
- [25]
- [26] X. Zou, L. Z. Yi, C. S. Jia, Phys. Lett. A346, 54, (2005).
- [27] C. S. Jia, P. Guo, X. L. Peng, J. Phys. A : Math, Gen 39, 7737 (2006).
- [28] N. Rosen et P. M. Morse, Phys. Rev. 42(1932) 210.
- [29] L. Hulthén, On the Virtual State of the Deuteron Ark. Mat. Astron. Fys. 28A (1942) 5.
- [30] R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys, 20, 367, (1948).
- [31] P. A. M. Dirac, Reviews of Modern Phys., 17, 2-3, (1945).
- [32] H. Kleinert, Path integrals in quantum mechanics, statistics polymer physics and financial markets (fourth ed., World Scientific, Singapore, 2006).

- [33] A. Arai, *J. Math. Anal. Appl.* 158(1991) 63; *J. Phys. A : Math. Gen.*34(2001) 4281.
- [34] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, *Tables of integrals, series and products* (Academic Press, New York, 1965).
- [35] F. Constantinescu et E. Magyari, *Problems in quantum mechanics* (Pergamon press, Oxford, 1978) p. 399, Eq. (30).
- [36] J. Schwinger, *On Gauge Invariance and Vacuum Polarization* *Phys. Rev.* 82 (1951) 664.
- [37] O. Bayrak, G. Kocak and I. Boztosun, *J. Phys. A : Math. Gen.* 39 (2006) 11521; C.Y.D.S. Sun and F.L. Lu, *Phys. Lett. A* 370 (2007) 219; W.C. Qiang and S.H. Dong, *PhysA* 368 (2007) 13.
- [38] S.M. Ikhdair and R. Sever Any l-state improved quasi-exact analytical solutions of the spatially dependent mass Klein-Gordon equation for the scalar and vector Hulthen potentials (Turkey 2009).
- [39] C. Grosche et F. Steiner, *A table of Feynman path integrals*, (Springer, Berlin, Heidelberg, 1998).
- [40] C. Grosche, *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993) 1.
- [41] Y. Fevziye, B. Cüneyt, B. Ayşe and Ö. Coşkun, *Exact Solutions of the Duffin-Kemmer-Petiau Equation for the Deformed Hulthen Potential* (*Physica Scripta*, Volume 71, Number 4, 2004).
- [42] H Egrifes, R Sever, *Bound states of the Dirac equation for the PT-symmetric generalized Hulthén potential by the Nikiforov–Uvarov method*, *Phys Lett A*, Vol 344, Issues 2–4, 5 September 2005, Pages 117-126.
- [43] F. Dominguez Adame *Bound states of the Klein-Gordon equation with vector and scalar Hulthén-type potentials* *Phys. Lett A*, Volume 136, Issues 4–5, 3 April 1989, Pages 175-177.

- [44] L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T. F. Hammann et A. Messouber, Path integral for Klein-Gordon particle in vector plus scalar Hulth6n-type potentials, *Physica A* 234 (1996) 289.
- [45] A. Zouache, Thèse de Doctorat soutenue le 22/11/2009, Université Mentouri de Constantine.
- [46] C. Grosche, *J. Phys. A : Math. Gen.* 38 (2005) 2947.
- [47] L. D. Landau et E. M. Lifchitz, *Quantum mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).
- [48] Chun-Sheng Jia, Xiao-Wei Jiang, Xiao-Guo Wang and Qui-Bo Yang 1997 *Acta. Phys. Sinica* 46 12
- [49] Chang-Yuang Chen and Si-Zhu Hu 1995 *Acta. Phys. Sinica* 44 9

Résumé

Dans ce présent travail, nous avons donné une étude variée de certains problèmes de la physique quantique du point de vue technique de résolution. Dans le contexte de la mécanique non relativiste il s'agit de la résolution de l'équation de Schrödinger quelques systèmes quantiques mettant des potentiels largement utilisés dans la description des interactions nucléaires, atomiques, interatomiques et moléculaires. Pour obtenir les fonctions d'onde ainsi le spectre d'énergie nous avons utilisé la technique de la mécanique quantique super symétrique, la méthode des itérations asymptotiques. Enfin, dans le contexte relativiste la formulation des intégrales de chemin à été utilisée. Les fonctions d'onde et le spectre de l'énergie pour chacune de ces méthodes ont été obtenus.

Abstract:

In this present work, we have given an varied study of some problems of quantum physics from the technical point of view of resolution. In the context of non-relativistic mechanics, this is the resolution of the Schrödinger equation, some quantum systems putting potentials widely used in the description of nuclear, atomic, interatomic and molecular interaction. To obtain the wave functions thus the energy spectrum we used the technique of super symmetric quantum mechanics, the asymptotic iteration method. Finally, in the relativistic context, the formulation of path integrals has been used. The wave functions and the energy spectrum for each of these methods have been obtained.

ملخص:

في هذا العمل ، قدمنا دراسة متنوعة لبعض مشاكل فيزياء الكم . في سياق الميكانيكا غير النسبية، هذا هو حل معادلة شرودنجر ، بعض الأنظمة الكمونية تضع إمكانات تستخدم على نطاق واسع في وصف التفاعلات النووية ، الذرية ، بين الذرية و الجزيئية. للحصول على وظائف الموجة وبالتالي طيف الطاقة، استخدمنا تقنية ميكانيكا الكم المتماثلة الفائقة طريقة التكرار المقارب. أخيراً، في السياق النسبي، تم استخدام صياغة تكامل المسار. ثم الحصول على وظائف الموجة وطيف الطاقة لكل من هذه الطرق .