

Ordre/F.S.S.A/UAMOB/

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur
et de la Recherche Scientifique
Université Akli Mohand Oulhadj - Bouira -
Tasdawit Akli Muḥend Ulḥağ - Tubirett -



وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة أكلي محمد أولحاج
- البويرة -

Faculté des Sciences et des Sciences Appliquées
Département de physique

Mémoire de fin d'étude

Présenté par :

Rahmani Sara

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

Filière : PHYSIQUE

Option : physique théorique

Thème :

La résolution de l'équation de Schrödinger par la méthode Ma-Xu avancée

Date de soutenance le 23 / 11 / 2020

Devant le jury composé de :

Mme S. ADDALA	Grade MCB	UAMOB	Présidente
Mme H. BACHI	Grade MAA	UAMOB	Encadreur
Mr S. BENAICHE	Grade MAA	UAMOB	Examineur
Mr B. ZAHAM	Grade MCB	UAMOB	Examineur

Année Universitaire 2019/2020

Remerciements

Louange à Allah qui nous a guidés à ceci. Nous n'aurions pas été guidés, si Allah ne nous avait pas guidés

Au terme de ce modeste travail, je ressens aussi bien la joie que le devoir de remercier tous ceux et toutes celles qui m'ont aidé de près ou de loin à l'élaboration de la présente étude et qui ont contribué d'une manière ou d'une autre à ma formation scientifique.

Tout d'abord, je voudrais remercier la directrice de la mémoire, Madame BACHI, pour sa présence, sa gentillesse, ses conseils avisés, les relisant attentivement et Son soutien est inestimable à tout moment.

Tout nos gratitudeux aux membres de jury qui nous ont fait l'honneur de juger ce travail:

- M^{me} S. ADDALA d'avoir accepté de présider le jury.
- M^r S. BENAICHE pour avoir accepté de juger ce travail.
- M^r B. ZEHAM pour avoir accepté de juger ce travail.

Dédicace

Je dédie ce travail à:
ma mère, mon père, mes frères, mes sœurs et Toute ma famille, mes collègues et mes amis pour
les encourager et leurs prières tout au long de mes études,
Tous mes amis, sans mentionner les noms de mes collègues de l'Université de Bouira, tous ceux
qui aiment Sarah.
Ainsi qu'à ma grande famille **RAHMANI**.

Table des matières

Remerciements	1
Dédicaces	1
Table des matières	1
Introduction	1
1 Equation de schrodinger et quantification de l'énergie	4
1.1 L'équation de schrödinger	4
1.2 Quantification de l'énergie	7
2 La réglele de quantification exact de Ma-Xu	10
2.1 L'oscilateur harmonique à une dimension	13
3 Application de la méthode Ma-Xu	17
3.1 Potentiel de Colomb généralisé	17
3.2 L'oscillateur harmonique généralisé	28
3.3 L'atome d'hydrogène	37
Conclusion	38
Annex : Intégrales usuelles	40
Bibliographie	42
Résumé	43
Abstract	44

Introduction

L'équation de Schrodinger est une équation fondamentale de la mécanique quantique non relativiste, elle joue le même rôle que l'équation de Newton en mécanique classique ou les équations de Maxwell en électromagnétisme. Elle décrit l'évolution temporelle et spatiale de l'état d'un système quantique représenté par une fonction d'onde. En pratique il existe deux types d'états quantiques différents : les états liés et les états de diffusion (libres ou quasi-libre). Les états liés correspondent à une quantification de l'énergie qui sont associés à un niveau d'énergie particulier. A l'inverse les états de diffusion sont attachés à un quantum énergétique ; l'énergie n'est plus quantifiée mais peut prendre toutes les valeurs permises de façon continue comme en mécanique classique [1].

La résolution de l'équation de Schrodinger a une grande importance en mécanique quantique car elle permet d'obtenir des spectres d'énergies et leurs fonctions d'ondes correspondantes néanmoins cette tâche est difficile pour plusieurs systèmes quantiques. Différentes méthodes existent pour résoudre l'équation de Schrödinger, le choix d'une méthode particulière repose généralement sur la forme du potentiel et sur celle de la fonction d'onde recherchée.

Pendant plusieurs années, l'étude des systèmes exactement solubles a reçu plus d'attention. Une vaste classe de potentiels non-centraux ont un intérêt considérable dû à leur grande utilité dans différentes branches de physique et de la chimie. Parmi les différents potentiels solubles, les potentiels généraux non-centraux ont été étudiés par différentes méthodes, parmi ces méthodes on peut citer : la méthode WKB [2] ; Wentzel-Kramer-Brillouin, la méthode Nikirov-Uvarov, l'approche supersymétrique, les intégrales de chemins ...

En 2004, Z. Q. Ma et B. W. Xu, ces deux physiciens ont proposé une nouvelle règle de quantification exacte, sans aucune approximation, et ont montré sa puissance dans le calcul des niveaux d'énergie des états liés pour certains systèmes quantiques exactement solubles. Cette méthode peut être vue comme une généralisation de la méthode WKB. En effet, elle comprend un terme supplémentaire appelé *correction quantique*, qui est un invariant et indépendant du nombre de nœuds de la fonction d'onde. Cette méthode a été appliquée avec succès au potentiel de l'o-

scillateur harmonique, au potentiel de Morse, au potentiel Rosen-Morse asymétrique, au potentiel Pöschel-Teller et aux systèmes tridimensionnels non-centraux et séparables non relativistes. Dans le cas relativiste, plusieurs potentiels à symétrie radiale ont été traités via cette technique.

En 2005, Ma et Xu, en s'appuyant sur les travaux du physicien Z. Q. Cao et ses collaborateurs ont amélioré cette nouvelle règle de quantification ,

De nombreux articles ont été publiés sur les applications possibles de la méthode de Ma-Xu à des différents systèmes [3][4]. L'avantage de cette méthode est d'estimer le spectre d'énergie, sans jamais ayant à résoudre l'équation de Schrodinger par les méthodes standard, ceci est rendu possible en utilisant au lieu d'une équation différentielle, une intégrale sur laquelle une condition de quantification est imposé.

Le but de ce travail est la résolution de l'équation de Schrödinger en appliquant la méthode de quantification exacte améliorée de Ma-Xu, et pour suivre le développement de cette méthode et de trouver les solutions de l'équation de Schrodinger par l'équation de Riccati unidimensionnelle, dans le cadre de la règle de quantification exacte, pour déduire les spectres d'énergies de chaque potentiel que nous allons étudier.

Ce mémoire est organisé de la façon suivante: Le premier chapitre sera dédié au rappel de l'équation de schrodinger et la quantification de l'énergie. Dans deuxième chapitre, nous présentons la règle de quantification exacte de Ma-Xu pour l'équation de Schrodinger suivi d'une application sur le potentiel harmonique unidimensionnel, Le troisième chapitre sera consacré à l'application directe de la méthode de Ma-Xu pour le potentiel de Coulomb généralisée, l'oscillateur harmonique généralisée et l'atome d'hydrogène.

On terminera par une conclusion, où on présentera un récapitulatif de tous les chapitre introduits dans ce mémoire et quelques perspectives, ainsi que d'un complément servant d'annexe pour le présent manuscrit.

Chapitre 1

Equation de schrodinger et quantification de l'énergie

Ce chapitre rappelle certaines notions essentielles en mécanique quantique : Equation que satisfait la fonction d'onde associée à une particule quantique, non relativiste, introduite en 1926 par *Erwin Schrodinger*

L'*équation de Schrödinger* joue un rôle important en physique quantique non-relativiste car c'est elle qui régit l'évolution dans le temps du système physique, nous présentons dans ce chapitre les propriétés les plus importantes de cette équation.

1.1 L'équation de schrödinger

La notion ondulatoire de la particule permet au physicien Erwin Schrodinger, de développer une équation d'onde pour décrire les propriétés ondulatoires d'une particule de masse m , plongée dans un potentiel $V(\vec{r})$. L'*équation de Schödinger dépendante du temps* [5] [6] s'écrit :

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

\hbar : constant de Planck réduite

\vec{r} : vecteur position

H : l'opérateur Hamiltonien (associé à l'énergie totale)

$\psi(\vec{r})$: étant la fonction d'onde associée à l'état de la particule. Cette fonction d'onde s'interprète comme l'amplitude de densité de probabilité pour trouver la particule à la position \vec{r} à l'instant t .

L'hamiltonien H peut être exprimé comme la somme de deux opérateurs : l'un qui correspond à l'énergie cinétique et l'autre à l'énergie potentielle

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r},t) \quad (1.2)$$

où P est l'opérateur quantité de mouvement. En utilisant la correspondance suivante [7],[8] :

$$P^2 \rightarrow -\hbar^2 \Delta \quad (1.3)$$

où Δ est le laplacien scalaire.

Equation de Schrödinger stationnaire

Lorsque l'hamiltonien du système physique ne dépend pas explicitement du temps; l'énergie totale du système est conservée, dans ce cas, l'équation de Schrodinger est dit stationnaire :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r},t) = E\psi(\vec{r},t) \quad (1.4)$$

où E est la valeur propre de l'hamiltonien. Les fonction d'ondes des états stationnaires en fonction du temps sont sous forme séparable (espace/temps) :

$$\psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \phi(\vec{r}) \quad (1.5)$$

En substituant l'équation (1.5) dans l'équation (1.4) nous obtenons :

l'équation de Schrödinger admet des solutions particulières sous forme :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r}) \quad (1.6)$$

c'est l'équation de Schrodinger indépendante du temps ou équation des états stationnaire, satisfaite par $\phi(\vec{r})$.

Les valeurs de E , spectre de l'énergie, peuvent être discret comme les solutions liées d'un puits de potentiel (par exemple les niveaux de l'atome d'hydrogène) il en résulte une quantification des niveaux d'énergie. Elles peuvent aussi correspondre à un spectre continu comme les solutions libres d'un puits de potentiel (par exemple un électron ayant assez d'énergie pour s'éloigner à l'infini du noyau de l'atome d'hydrogène). L'état stationnaire correspondant à la plus petite valeur de E du spectre est appelée " *état fondamental du système* ".

L'équation de Schrödinger à trois dimensions

la solution analytique de l'équation de Schrodinger stationnaire a été trouvée seulement pour quelques systèmes physiques comme l'atome d'hydrogène ,il s'agit de résoudre l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien H associé à l'énergie E de la particule :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \quad (1.7)$$

Δ : l'opérateur laplatien est le carrée d'opérateur nabla ∇

L'opérateur Δ dans le système des coordonnées sphériques s'écrit comme suit :

$$\Delta = \vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (1.8)$$

L'hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + V(r) \quad (1.9)$$

Ce qui permet d'écrire l'équation aux valeurs propres sous la forme :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi) \quad (1.10)$$

Les systèmes stationnaires sont représentés par un hamiltonien indépendant du temps, Ces systèmes sont difficiles à résoudre exactement, particulièrement la solution analytique de l'équation de Schrodinger.

Propriétés de l'équation de Schrodinger

- a) Elle est linéaire et homogène en $\psi(\vec{r},t)$, par conséquent elle prend en compte le principe de superposition (la solution peut être ajoutée en amplitude ou en phase pour pouvoir reproduire le phénomène d'interférence).
- b) C'est une équation différentielle du premier ordre par rapport au temps. Cette condition est nécessaire pour que l'état du système représenté par $\psi(\vec{r},t)$ à l'instant déterminera son état à tous les instants ultérieurs.
- c) La fonction d'onde $\psi(\vec{r},t)$ doit satisfaire les conditions suivantes :
 1. elle doit être continue.
 2. elle ne doit pas prendre des valeurs infinies.
 3. la dérivée de $\psi(\vec{r},t)$ par rapport à la position doit être continue.
 4. elle doit être normalisée : $\int \psi(\vec{r},t)\psi^*(\vec{r},t)d\vec{r} = 1$

Les solutions pour $\psi(\vec{r},t)$ qui ne satisfont pas ces propriétés ne correspondent généralement pas à des situations physiquement réalisables.

1.2 Quantification de l'énergie

La mécanique quantique est la théorie qui permet de décrire la structure des atomes et des molécules ainsi que d'interpréter les divers phénomènes qui leur sont liés individuellement. Avant d'aborder la quantification proprement dite, nous allons donner un aperçu relative à cette notion.

Tous les corps émettent et absorbent continuellement des radiations électromagnétique mais leurs propriétés d'émission et d'absorption sont très variées.

La théorie classique basée sur l'énergie émise et absorbée de manière continue par des oscillateurs en équilibre thermique, fut impuissante à rendre compte des résultats expérimentaux. Ce fut **Max Planck** qui réussit, en 1900, à obtenir une formule théorique convenable, en supposant qu'un oscillateur ne pouvait échanger de l'énergie que par quantité discrètes appelées **quanta**. Pour cela, **Planck** postula que la valeur du quantum d'énergie E dépendait de la fréquence ν de l'oscillateur selon la formule

$$E = h \nu$$

où h est une constante appelée **constante de Planck**. Par cette hypothèse, **Planck** abandonnait la physique classique suivant laquelle tout système physique est susceptible de changements continus. Il est ainsi premier fondateur de la physique quantique.

En 1913, **Bohr** reprit le modèle de l'atome d'hydrogène, proposé auparavant par **Rutherford**, imaginé constitué par d'un électron tournant sur une orbite circulaire autour d'un noyau central portant une charge positive égale, en valeur absolue, à celle de l'électron.

Bohr postula que l'électron peut tourner sur des orbites privilégiées, appelées orbites stationnaires, où il n'échange aucune énergie avec le milieu extérieur, Cette hypothèse allait à l'encontre de la théorie classique selon laquelle une charge électrique en mouvement soumise à une accélération rayonne en permanence une énergie électromagnétique.

Une deuxième hypothèse fut également retenue, basée sur l'idée que les échanges d'énergie se faisaient par quanta. **Bohr** postula que toute cession d'énergie par un atome au milieu extérieur se fait lors du transfère de l'électron d'une orbite stationnaire à une autre, également stationnaire, avec émission d'un seul quanta d'énergie.

L'énergie totale E_n de l'électron tournant sur une orbite stationnaire est égale à la somme de ses énergie cinétique et potentiel. Le calcul conduit à la formule suivante :

$$E_n = - \frac{2 \pi^2 m_e e^4}{h^2} \frac{1}{n^2} = - \frac{m_e e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (1.11)$$

où $n = 1, 2, 3, \dots$; m_e est la masse de l'électron, $h = 2 \pi \hbar$

Lorsque l'électron passe d'une orbite stationnaire à une autre d'énergie inférieure son énergie varie d'une quantité ($E_n - E_m$). La longueur λ du rayonnement émis par l'atome d'hydrogène s'obtient en utilisant la relation du quantum de **Planck** :

$$(E_n - E_m) = h \nu = \frac{h c}{\lambda} \quad (1.12)$$

Remplaçant dans la formule (1.12) E_n et E_m par leur expression (1.11), on obtient :

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{2 \pi^2 m_e e^4}{c h^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.13)$$

On retrouve la formule :

$$\frac{1}{\lambda} = R_\infty \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.14)$$

qui a été déjà fut généralisée par **Rit** en 1908, où $m = 1, 2, 3, 4, 5$ et n la suite des entiers $n > m$.

Pour $m = 2$, on trouve la formule de **Balmer**. Cette dernière est vérifiée avec une très grande précision et elle a joué un rôle important par la suite pour la validation des modèle atomique.

La formule (1.13), validée par l'expérience, fit le succès immédiat du modèle de **Bohr**.

Le modèle de **Bohr** fût parfait pour décrire l'atome d'hydrogène et les autres système à un seul électron (les hydrogènoïde) tels que l'ion de He^+ . Malheureusement, il ne s'applique pas au spectre des atomes complexe. De plus, le modèle de **Bohr** n'explique pas de tout pourquoi des sont plus intense que d'autres, ni pourquoi certaines raies se séparent en plusieurs raies en présence d'un champ magnétique (l'effet **Zeeman**).

Dans les décennies qui ont suivi, les travaux des scientifiques comme **Erwin Schrödinger** prouvèrent que les électrons se comportaient à la fois comme des ondes et comme des particules. Cela signifie qu'il n'est pas possible de connaître précisément en même temps à la fois la position et la quantité de mouvement d'un électron donné dans l'espace, concept connu sous le nom de **principe d'incertitude de Heisenberg**. Le principe d'incertitude contredis l'hypothèse de **Bohr** selon laquelle les électrons évoluent sur des orbites spécifiques, avec une vitesse et un rayon orbital connus. A la place, on ne peut que calculer des probabilité de trouver l'électron dans une certaine région de l'espace autour du noyau.

Le modèle moderne issu de la mécanique quantique peut sembler très éloigné du modèle de **Bohr**, mais en fait l'idée principale reste la même : la physique classique ne suffit pas pour expliquer tous le phénomènes au niveau atomique. **Bohr** fût le premier à la reconnaître en introduisant l'idée de quantification dans son modèle de la structure de l'atome d'hydrogène.

Chapitre 2

La règle de quantification exact de Ma-Xu

Dans ce chapitre nous donnons une brève présentation de la règle de quantification exacte améliorée, pour l'équation de Schrödinger, développée par Ma-Xu [8]

A une dimension, l'équation de Schrödinger s'écrit sous la forme suivante :

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) \quad (2.1)$$

où m est la masse de la particule, et le potentiel $V(x)$ est une fonction réelle continue par morceaux de x . Pour déterminer les deux points tournants x_A et x_B :

$$\begin{aligned} V(x) &> E && -\infty < x < x_A \text{ ou } x_B < x < \infty \\ V(x) &= E && x = x_A \text{ ou } x = x_B \\ V(x) &< E && x_A < x < x_B \end{aligned}$$

entre ces deux points tournants, le moment $K(x)$ est :

$$K(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}/\hbar \quad (2.2)$$

D'après Yang, 'Pour le problème Sturm-Liouville, l'astuce fondamentale est la définition d'un angle de phase qui est monotone par rapport à l'énergie", Cet angle de phase est la dérivée logarithmique $\phi(x) = \psi(x)^{-1}d\psi(x)/dx$ de la fonction d'onde , D'après le théorème de Sturm-Liouville, $\phi(x)$, en tout point donné $x = x_0$, est monotone par rapport à l'énergie. En introduisant $\phi(x)$ dans l'équation de Schrödinger (2.1)

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \phi(x).\psi(x) \quad (2.3)$$

En substituant la dérivée logarithmique, l'équation (2.3), dans l'équation de Schrödinger (2.1) on obtient :

$$\frac{d\phi(x)}{dx} = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)] - \phi(x)^2 \quad (2.4)$$

c'est l'équation de Riccati en $\phi(x)$, c'est une équation différentielle du premier ordre et donc c'est plus facile de résoudre cette dernière et de trouver ses solutions que de chercher celles de l'équation de Schrödinger.

posons

$$\tan \theta(x) = K(x)/\phi(x)$$

alors

$$\theta(x) = \arctan \left[K(x)/\phi(x) \right] + n\pi$$

où $\arctan(\beta)$ dénote la valeur principale de la fonction inverse de tangente

$$-\pi/2 < \arctan(\beta) < \pi/2$$

où n augmente par unité quant à x croix entre les deux noeuds de $\phi(x)$ lorsque $E \geq V(x)$ de l'équation (2.4). Alors, nous avons

$$\frac{d\theta(x)}{dx} = K(x) - \phi(x) \left[\frac{dK(x)}{dx} \right] \left[\frac{d\phi(x)}{dx} \right]^{-1} \quad (2.5)$$

Nous intégrons les deux membres de l'équation (2.5), entre les deux points tournants, nous obtenons la règle de quantification exacte sans aucune approximation :

$$\int_{x_A}^{x_B} K(x) dx = N\pi + \int_{x_A}^{x_B} \phi(x) \left[\frac{dK(x)}{dx} \right] \left[\frac{d\phi(x)}{dx} \right]^{-1} dx \quad (2.6)$$

Comme x_A et x_B sont deux points de retournement déterminés par $E = V(x)$, le $N = n + 1$ est le nombre de noeuds de $\phi(x)$ dans la région $E = V(x)$ est plus grand de un que le nombre n de noeuds de fonction d'onde $\psi(x)$ le premier terme $N\pi$ est la contribution des noeuds de la dérivée logarithmique de la fonction d'onde, et le second est appelé correction quantique [9]

la règle de quantification peut être généralisée à l'équation de Schrödinger à trois dimensions pour des potentiels à symétrie sphérique . Après séparation des variables, l'équation radiale de la fonction d'onde :

$$\psi(r) = r^{-1}R(r)Y_m^l(\theta, \varphi)$$

on obtient la partie radiale de l'équation de Schrödinger

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] R(r) \quad (2.7)$$

avec

$$U(r) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \quad (2.8)$$

la règle de quantification (2.6) est généralisée pour le cas de l'équation de Schrödinger à trois dimensions avec un potentiel à symétrie sphérique, en remplaçant $x \rightarrow r$ et $V(x) \rightarrow V(r)$

$$\int_{r_A}^{r_B} K(r) dr = N\pi + \int_{r_A}^{r_B} \phi(r) \left[\frac{dK(r)}{dr} \right] \left[\frac{d\phi(r)}{dr} \right]^{-1} dr \quad (2.9)$$

avec

$$K(r) = \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2} (E - V_{eff}(r))}$$

la correction quantique est indépendante du nombre de noeuds de la fonction d'onde, considérer l'état fondamental dans le calcul de la correction quantique

$$Q_c = \pi + \int_{r_A}^{r_B} K'_0(r) \frac{\phi_0(r)}{\phi'_0(r)} dr \quad (2.10)$$

cette règle de quantification a été utilisée dans de nombreux systèmes physiques pour obtenir les solutions exactes de nombreux systèmes quantiques exactement solubles

$$\int_{r_A}^{r_B} K(r) dr = \pi + \int_{r_A}^{r_B} \phi_0(r) \left[\frac{dK_0(r)}{dr} \right] \left[\frac{d\phi_0(r)}{dr} \right]^{-1} dr \quad (2.11)$$

avec

$$K_0(r) = \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2} (E_0 - V_{eff}(r))}$$

où $N = 1$ ($n = 0$). Ainsi, la correction quantique devient [10]

$$\int_{r_A}^{r_B} \phi_0(r) \left[\frac{dK_0(r)}{dr} \right] \left[\frac{d\phi_0(r)}{dr} \right]^{-1} dr = \int_{r_A}^{r_B} K_0(r) dr - \pi \quad (2.12)$$

Ainsi, nous pouvons facilement obtenir l'énergie non relativiste, l'équation aux valeurs propres

comme suit:

$$\int_{r_A}^{r_B} K(r)dr = \int_{r_A}^{r_B} K_0(r)dr = (N-1)\pi = n\pi \quad (2.13)$$

Les niveaux d'énergie du système sont directement donnés par la règle de quantification (2.5), en utilisant l'équation (2.6), on obtient :

$$2\pi K_N = N\pi - \arctan \frac{K(x)}{\phi_N(x_A)} + \arctan \frac{K(x)}{\phi_N(x_B)} \quad (2.14)$$

où

$$\phi_N(x_A) = \sqrt{2M(V_A - E_N)}\hbar \quad (2.15)$$

et

$$\phi_N(x_B) = \sqrt{2M(V_B - E_N)}\hbar \quad (2.16)$$

la méthode présentée ici est systématique, efficace et pratiquement facile à généralisée à d'autres systèmes quantiques exactement solubles

2.1 L'oscilateur harmonique à une dimension

Le potentiel de l'oscillateur harmonique unidimensionnel est de la forme :

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.17)$$

On a :

$$K(x) = \sqrt{2m(E_n - V(x))}/\hbar \quad (2.18)$$

D'après la règle de quantification exacte, on a intégrales suivante à calculer :

$$\begin{aligned} \int_{x_A}^{x_B} K(x)dx &= \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{2m(E_n - \frac{1}{2}M\omega^2 x^2)}/\hbar dx \\ &= \sqrt{2m} \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{\frac{E_n}{\hbar} - \frac{M\omega^2 x^2}{2\hbar^2}} dx \\ &= \frac{M\omega}{\hbar} \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{\frac{2E_n\hbar}{m\omega^2\hbar} - x^2} dx \\ &= \alpha^2 \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{\frac{2E_n\hbar}{m\omega^2\hbar} - x^2} dx \end{aligned}$$

où

$$\alpha = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}}$$

la solution de cette équation

$$\frac{2E_n\hbar}{mw^2\hbar} - x^2 = 0$$

D'où :

$$x = \mp\alpha^{-1}\sqrt{\frac{2E_n}{\hbar w}}$$

Il existe deux solutions :

$$x_B = -x_A = \alpha^{-1}\sqrt{\frac{2E_n}{\hbar w}} \quad (2.19)$$

Nous avons la somme et la différence suivantes :

$$x_B + x_A = 0 \quad (2.20)$$

et

$$x_B x_A = \frac{2E_n}{Mw^2\hbar^2} \quad (2.21)$$

En substituant les équations (2.19) et (2.21), dans l'équation de terme du correction, on obtient :

$$\int_{x_A}^{x_B} K(x)dx = \alpha^2 \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{-x^2 + (x_B + x_A)x + x_B x_A} dx \quad (2.22)$$

$$= \alpha^2 \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{(x - x_A)(x_B - x)} dx \quad (2.23)$$

En utilisant l'intégrale suivante [11]:

$$I^{WKB} = \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{(x - x_A)(x_B - x)} dx = \frac{\pi}{8}(x_B - x_A)^2 \quad (2.24)$$

On trouve

$$\int_{x_A}^{x_B} K(x)dx = \pi \frac{E_n}{\hbar w} \quad (2.25)$$

La règle de quantification (2.5) coïncide avec la règle de quantification (2.25):

$$\int_{x_A}^{x_B} K(x)dx = (n + 1/2)\pi \quad (2.26)$$

On calcule la deuxième intégrale de la règle de quantification (2.6)

$$K_0(x) = \sqrt{2m(E_0 - V(x))}/\hbar \quad (2.27)$$

la dérivée de $K_0(x)$

$$K_0'(x) = -\frac{mw}{\hbar} \left(\frac{x}{\sqrt{-x^2 + \frac{2E_0}{Mw^2}}} \right) \quad (2.28)$$

avec

$$E_0 = \hbar w/2 \quad (2.29)$$

En remplaçant par l'équation de Riccati, avec le potentiel de l'oscillateur harmonique, on trouve :

$$\phi_0(x) = -\alpha^2 x$$

$$\begin{aligned} \int_{x_A}^{x_B} \phi_0(x) \left[\frac{dK_0(x)}{dx} \right] \left[\frac{d\phi_0(x)}{dx} \right]^{-1} &= \frac{Mw}{\hbar} \int_{x_A}^{x_B} \frac{-x^2}{\sqrt{-x^2 + \frac{2E_0}{Mw^2}}} dx \\ &= \alpha^2 \int_{x_A}^{x_B} \frac{-x^2 - \frac{\hbar}{Mw} + \frac{\hbar}{Mw}}{\sqrt{-x^2 + \frac{2E_0}{Mw^2}}} dx \\ &= \alpha^2 \left[\int_{x_A}^{x_B} dx \sqrt{-x^2 + \frac{2E_0}{Mw^2}} - \alpha^{-2} \int_{x_A}^{x_B} \frac{dx}{\sqrt{-x^2 + \frac{2E_0}{Mw^2}}} \right] \\ &= \alpha^2 \int_{x_A}^{x_B} dx \sqrt{-x^2 + \frac{2E_0}{Mw^2}} - \int_{x_A}^{x_B} \frac{dx}{\sqrt{-x^2 + \frac{2E_0}{Mw^2}}} \\ &= \alpha^2 I^{(1)} + I^{(2)} \end{aligned}$$

où

$$x_B = -x_A = \alpha^{-1} \sqrt{\frac{2E_0}{\hbar w}} \quad (2.30)$$

On utilise les deux intégrales :

$$I^{(2)} = \int_{x_A}^{x_B} \frac{dx}{\sqrt{(x - x_A)(x_B - x)}} = \pi \quad (2.31)$$

et

$$I^{(1)} = \int_{x_A}^{x_B} \frac{dx}{\sqrt{(x - x_A)(x_B - x)}} = \frac{\pi}{8} (x_B - x_A)^2 \quad (2.32)$$

Ce qui donne :

$$\int_{x_A}^{x_B} \phi(x) \left[\frac{dK(x)}{dx} \right] \left[\frac{d\phi(x)}{dx} \right]^{-1} = \pi \frac{E_0}{\hbar\omega} - \pi \quad (2.33)$$

On trouve :

$$\int_{x_A}^{x_B} \phi_0(x) \left[\frac{dK_0(x)}{dx} \right] \left[\frac{d\phi_0(x)}{dx} \right]^{-1} = -\frac{\pi}{2} \quad (2.34)$$

En utilise l'égalité de l'équations (2.25) et (2.26) ,on obtient:

$$\pi \frac{E_n}{\hbar\omega} = (n + 1/2)\pi \quad (2.35)$$

Les niveaux des énergies de l'oscillateur harmonique unidimensionnel sont :

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega \quad (2.36)$$

Chapitre 3

Application de la méthode Ma-Xu

dans ce chapitre, nous allons procéder à la résolution de l'équation de Schrödinger pour : le potentiel de Coulomb généralisé, l'oscillateur harmonique généralisé ainsi que l'atome d'hydrogène dans le cadre de quantification exacte de Ma-Xu, après séparation des variables angulaire et radiales.

3.1 Potentiel de Colomb généralisé

le potentiel de Coulomb généralisé est de la forme [9] :

$$V(r,\theta) = \frac{V_1}{r} + \frac{V_2}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{V_3 \cos \theta}{\sin^2 \theta} \quad (3.1)$$

$$\Delta \psi(r,\theta,\varphi) = -[E - V(\vec{r})] \psi(r,\theta,\varphi) \quad (3.2)$$

avec

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{r} R(r) Y(\theta) e^{im\varphi} \quad (3.3)$$

En appliquant la méthode de séparation des variables pour le potentiel de la forme suivant :

$$V(r,\theta) = U(r) + \frac{V_1(\theta)}{r^2} + \frac{V_2(\varphi)}{\sin^2 \theta} \quad (3.4)$$

$U(r)$: est un potentiel radial V_1 et V_2 : sont des constantes positives la séparation entre les variable pour l'équation de Schrödinger :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] \psi(r,\theta,\varphi) = -[E - V(\vec{r},\theta)] \psi(r,\theta,\varphi) \quad (3.5)$$

on remplace l'équation (3.3) dans l'équation (3.5), obtient :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] \frac{1}{r} R(r) Y(\theta) e^{im\varphi} = - \left[E - V(r, \theta) \right] \frac{1}{r} R(r) Y(\theta) e^{im\varphi} \quad (3.6)$$

en multipliant par r^2

$$r^2 \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] \frac{1}{r} R(r) Y(\theta) e^{im\varphi} = -r^2 \left[E - V(r, \theta) \right] \frac{1}{r} R(r) Y(\theta) e^{im\varphi} \quad (3.7)$$

en multipliant par $\frac{r}{R(r)Y(\theta)e^{im\varphi}}$

$$\frac{r^2}{R(r)} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] R(r) + \frac{1}{Y(\theta)e^{im\varphi}} \left[\left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] Y(\theta) e^{im\varphi} = -r^2 \left[E - V(r, \theta) \right] \quad (3.8)$$

$$\frac{r^2}{R(r)} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] R(r) + \frac{1}{Y(\theta)e^{im\varphi}} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] Y(\theta) e^{im\varphi} + r^2 \left[E - V(\vec{r}, \theta) \right] = 0 \quad (3.9)$$

On remplace l'équation (3.4) dans (3.9), on trouve :

$$\frac{r^2}{R(r)} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] R(r) + r^2 \left(E - \frac{V_1}{r} \right) - \frac{1}{Y(\theta)e^{im\varphi}} \left[\left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] Y(\theta) e^{im\varphi} - E \frac{V_2 + V_3 \cos \theta}{\sin^2 \theta} = a \quad (3.10)$$

a : constant de séparation des variables on obtient les deux équation différentielles, donc :

$$\frac{dR(r)^2}{dr^2} + \left[E - \frac{V_1}{r} - \frac{a}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (3.11)$$

on pose

$$a = l(l+1) \quad (3.12)$$

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \left[E - \frac{V_1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (3.13)$$

la partie angulaire :

$$\left[\left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} - \frac{V_2 + V_3 \cos \theta}{\sin^2 \theta} - a \right] Y(\theta) e^{im\varphi} = 0 \quad (3.14)$$

en multipliant $\frac{\sin^2 \theta}{Y(\theta) e^{im\varphi}}$

$$\frac{\sin^2 \theta}{Y(\theta)} \left[\frac{d^2}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d}{d\theta} \right] Y(\theta) + (-V_2 - V_3 \cos \theta + a \sin^2 \theta) + \frac{1}{e^{im\varphi}} = 0 \quad (3.15)$$

alors

$$\frac{\sin^2 \theta}{Y(\theta)} \left[\frac{d^2}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d}{d\theta} \right] Y(\theta) + (-V_2 - V_3 \cos \theta + a \sin^2 \theta) - \frac{1}{e^{im\varphi}} = b^2 \quad (3.16)$$

l'équation différentielle angulaire :

$$\left[\frac{d^2}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{V_2 + V_3 \cos \theta}{\sin^2 \theta} + a - \frac{b^2}{\sin^2 \theta} \right] Y(\theta) = 0 \quad (3.17)$$

en remplace $a = l(l+1)$ et $b^2 = m$ dans l'équation (3.1), on obtient :

$$\left[\frac{d^2}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{V_2 + V_3 \cos \theta}{\sin^2 \theta} + l(l+1) - \frac{m}{\sin^2 \theta} \right] Y(\theta) = 0 \quad (3.18)$$

donc

$$\frac{d^2 Y(\theta)}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{dY(\theta)}{d\theta} + \left[l(l+1) - \frac{m}{\sin^2 \theta} - \frac{V_2 + V_3 \cos \theta}{\sin^2 \theta} \right] Y(\theta) = 0 \quad (3.19)$$

On utilisant changement de variable :

$$\theta = \omega(x) \quad (3.20)$$

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} + \left(-\frac{\omega''}{\omega'} + \omega' \cot \omega \right) \frac{dY}{dx} + \left[l(l+1) \sin^2 \omega - V_3 \cos \omega \right] Y = (m^2 + V_2) Y \quad (3.21)$$

à partir de l'équation de Schrödinger , on a :

$$-\frac{\omega''}{\omega'} + \omega' \cot \omega = 0 \quad (3.22)$$

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} + \cot \omega(x) \frac{dY}{d\omega(x)} \left[-\frac{V_2 + V_3 \cos \omega(x)}{\sin^2 \omega(x)} + l(l+1) - \frac{m}{\sin^2 \omega(x)} \right] Y = 0 \quad (3.23)$$

on a

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} + \left[l(l+1) \sin^2 \omega(x) - V_3 \cos \omega(x) - (m^2 + V_2) \right] Y = 0 \quad (3.24)$$

l'équation angulaire :

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} + \left[l(l+1) \sin^2 \omega(x) - V_3 \cos \omega(x) \right] Y = (m^2 + V_2) Y \quad (3.25)$$

on a

$$\tan(\omega/2) = e^x \quad (3.26)$$

où

$$\sin \omega = \sec hx \quad (3.27)$$

et

$$\cos \omega = -\tanh x \quad (3.28)$$

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} + \left[l(l+1) \sec hx - V_3 \tanh x \right] Y = (m^2 + V_2) Y \quad (3.29)$$

$$V_{eff}(x) = l(l+1) \sec hx - V_3 \tanh x \quad (3.30)$$

où $V(x_A) = V(x_B) = E_n$
avec

$$K_n(x) = \sqrt{2M(E_n - V_{eff}(x))}/\hbar$$

$$dx = \frac{1}{1-y^2} dy \quad (3.31)$$

et on prend $2M = \hbar = 1$

$$\int_{x_A}^{x_B} K_n(x) dx = \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{(E_n - l(l+1) \sec hx - V_3 \tanh x)} dx \quad (3.32)$$

$$= \int_{y_A}^{y_B} \sqrt{E_n - l(l+1)y^2 + V_3 y + l(l+1)} \frac{dy}{1-y^2} \quad (3.33)$$

$$= \sqrt{l(l+1)} \int_{y_A}^{y_B} \sqrt{-y^2 + \frac{V_3}{l(l+1)} y + \left(\frac{E_n}{l(l+1)} + 1 \right)} \frac{dy}{1-y^2} \quad (3.34)$$

la solution de cette équation

$$-y^2 + \frac{V_3}{l(l+1)} y + \left(\frac{E_n}{l(l+1)} + 1 \right) = 0$$

$$\Delta = \left(\frac{V_3}{l(l+1)}\right)^2 - 4\left(\frac{E_n}{l(l+1)} + 1\right)$$

les points tournants y_A et y_B sont donnés par :

$$y_A = \frac{1}{2}\left[\frac{V_3}{l(l+1)} - \sqrt{\left(\frac{V_3}{l(l+1)}\right)^2 - 4\left(\frac{E_n}{l(l+1)} + 1\right)}\right] \quad (3.35)$$

et

$$y_B = \frac{1}{2}\left[\frac{V_3}{l(l+1)} + \sqrt{\left(\frac{V_3}{l(l+1)}\right)^2 - 4\left(\frac{E_n}{l(l+1)} + 1\right)}\right] \quad (3.36)$$

on peut facilement déduire la somme et la différence

$$y_A + y_B = \frac{V_3}{l(l+1)} \quad (3.37)$$

$$y_A y_B = -\left(\frac{E_n}{l(l+1)} + 1\right) \quad (3.38)$$

en utilise cette intégrale

$$\int_{y_A}^{y_B} \sqrt{(y - y_A)(y_B - y)} \frac{dy}{1 - y^2} = \frac{\pi}{2} [2 - \sqrt{(1 - y_A)(1 - y_B)} - \sqrt{(1 + y_A)(1 + y_B)}] \quad (3.39)$$

en remplace l'équation (3.35) et(3.36) dans (3.39), on trouve :

$$\int_{x_A}^{x_B} K_n(x) dx = \pi [\sqrt{l(l+1)} - \frac{1}{2}\sqrt{-E_n + V_3} - \frac{1}{2}\sqrt{-E_n - V_3}] \quad (3.40)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} \phi_0(x) \left[\frac{dK_0(x)}{dx}\right] \left[\frac{d\phi_0(x)}{dx}\right]^{-1} = \int_{x_A}^{x_B} K_0(x) dx - \pi \quad (3.41)$$

avec

$$\phi_0(x) = C_1 y + C_2 \quad (3.42)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} K_0(x) dx = \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{(E_0 - l(l+1) \operatorname{sech}^2 x - V_3 \tanh x)} dx \quad (3.43)$$

$$= \int_{y_A}^{y_B} \sqrt{E_0 - l(l+1)y^2 + V_3 y + l(l+1)} \frac{dy}{1-y^2} \quad (3.44)$$

$$= \sqrt{l(l+1)} \int_{y_A}^{y_B} \sqrt{-y^2 + \frac{V_3}{l(l+1)} y + \left(\frac{E_0}{l(l+1)} + 1\right)} \frac{dy}{1-y^2} \quad (3.45)$$

$$= \sqrt{l(l+1)} \int_{y_A}^{y_B} \sqrt{(y-y_A)(y_B-y)} \frac{dy}{1-y^2} \quad (3.46)$$

$$= \sqrt{l(l+1)} \frac{\pi}{2} [2 - \sqrt{(1-x_1)(1-x_2)} - \sqrt{(1+x_1)(1+x_2)}] \quad (3.47)$$

$$= \pi \left[\sqrt{l(l+1)} - \frac{1}{2} \sqrt{-E_0 + V_3} - \frac{1}{2} \sqrt{-E_0 - V_3} \right] \quad (3.48)$$

avec

$$E_0 = -l(l+1) + C_1 - C_2^2 \quad (3.49)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} K_0(x) dx - \pi = \pi \left[\sqrt{l(l+1)} - \frac{1}{2} \sqrt{-E_0 + V_3} - \frac{1}{2} \sqrt{-E_0 - V_3} - 1 \right] \quad (3.50)$$

on trouve :

$$\int_{x_A}^{x_B} \phi_0(x) \left[\frac{dK_0(x)}{dx} \right] \left[\frac{d\phi_0(x)}{dx} \right]^{-1} = \pi \left[\sqrt{l(l+1)} - l + 1 \right] \quad (3.51)$$

en utilisant l'intégrale :

$$\int_{x_A}^{x_B} K_n(x) dx = N\pi + \int_{x_A}^{x_B} \phi_0(x) \left[\frac{dK_0(x)}{dx} \right] \left[\frac{d\phi_0(x)}{dx} \right]^{-1} \quad (3.52)$$

avec $N = n + 1$ on obtient :

$$\pi \left[\sqrt{l(l+1)} - \frac{1}{2} \sqrt{-E_n + V_3} - \frac{1}{2} \sqrt{-E_n - V_3} \right] = (n+1)\pi + \pi \left[\sqrt{l(l+1)} - l + 1 \right] \quad (3.53)$$

tous les potentiels de la première catégorie sont tels qu'il existe un changement de la variable $x \rightarrow y$ transformant le potentiel en un harmonique :

$$V(x) \rightarrow V(y) = a(a + \alpha^2)y^2 + \lambda_1 y + \lambda_0 \quad (3.54)$$

avec

$$V(y) = l(l+1)y^2 + V_3y - l(l+1) \quad (3.55)$$

Le potentiel peut encore s'écrire $V(y)$

$$\lambda_1 = -V_3, \text{et}, \lambda_0 = -l(l+1)$$

$$V(y) = l(l+1)(y - y_0^2) + V_0 \quad (3.56)$$

ou

$$y_0 = V_3/l(l+1) \quad (3.57)$$

et

$$V_0 = l(l+1)[-1 - (\frac{V_3}{l(l+1)})^2] \quad (3.58)$$

avec

$$l_n = (l - n) \quad (3.59)$$

on a

$$\phi(l_n) = l_n^2 + (\frac{\lambda_1}{4l_n})^2 \quad (3.60)$$

On remplace l'équation (3.59) dans l'équation (3.60), on trouve

$$\phi(l_n) = (l - n)^2 + (\frac{-V_3}{4(l - n)})^2 \quad (3.61)$$

pour déterminer l'énergie on a la condition :

$$E_n = V_y \Leftrightarrow E_n = l(l+1)[u^2 - 1 - (\frac{-V_3}{4(l - n)})^2] \quad (3.62)$$

où

$$u^2 = 1 + y_0^2 - \frac{\phi(l_n)}{l(l+1)} \quad (3.63)$$

en remplace les équation (3.57) et(3.61) dans(3.63),ce qui donne :

$$u^2 = 1 + (\frac{V_3}{4(l - n)})^2 - \frac{1}{l(l+1)} \left[(l - n)^2 + (\frac{V_3}{4(l - n)})^2 \right] \quad (3.64)$$

en remplaçant l'équation (3.62) dans (3.64), nous obtenons l'expression du spectre de potentiel

Coulombien :

$$E_n = -(l-n)^2 - \frac{V_3^2}{4(l-n)^2} \quad (3.65)$$

à parti de l'équation différentielle (3.29), on pose :

$$E_n = -(m^2 + V_2) \quad (3.66)$$

en remplace (3.66) dans (3.65) et multipliant $(l-n)^2$, on obtient :

$$-(l-n)^4 + (m^2 + V_2)(l-n)^2 - \frac{V_3^2}{4} = 0 \quad (3.67)$$

la solutions de cette équation

$$\Delta = (m^2 + V_2)^2 - V_3^2 \quad (3.68)$$

On a

$$(l-n)^2 = \frac{1}{2}[(m^2 + V_2) + \sqrt{(m^2 + V_2)^2 - V_3^2}] \quad (3.69)$$

donc

$$l = n + \sqrt{\frac{1}{2}[(m^2 + V_2) + \sqrt{(m^2 + V_2)^2 - V_3^2}]} + n \quad (3.70)$$

l'équation radiale :

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \left[E - \frac{V_1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \quad (3.71)$$

Pour la solution de la partie radiale, nous allons nous intéresser au potentiel Coulombien :

$$V_{eff}(r) = \frac{V_1}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (3.72)$$

$$\int_{r_A}^{r_B} K_n(r) dr = \int_{r_A}^{r_B} \sqrt{(E_N - (\frac{V_1}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}))} dr \quad (3.73)$$

$$= \int_{r_A}^{r_B} \frac{1}{r} \sqrt{-r^2 + \frac{V_1}{E_N} r + \frac{l(l+1)}{E_N}} dr \quad (3.74)$$

$$(3.75)$$

la solution de cette équation

$$-r^2 + \frac{V_1}{E_N}r + \frac{l(l+1)}{E_N} = 0$$

$$\Delta = \left(\frac{V_1}{E_N}\right)^2 + 4\frac{l(l+1)}{E_N}$$

les points tournants

$$r_A = \frac{1}{2} \left[\frac{V_1}{E_N} - \sqrt{\left(\frac{V_1}{E_N}\right)^2 + 4\frac{l(l+1)}{E_N}} \right] \quad (3.76)$$

et

$$r_B = \frac{1}{2} \left[\frac{V_1}{E_N} + \sqrt{\left(\frac{V_1}{E_N}\right)^2 + 4\frac{l(l+1)}{E_N}} \right] \quad (3.77)$$

La somme et la différence

$$r_A + r_B = \frac{V_1}{E_N} \quad (3.78)$$

et

$$r_A r_B = \frac{l(l+1)}{-E_N} \quad (3.79)$$

On utilise l'intégrale suivante :

$$\int_{r_A}^{r_B} \frac{1}{r} \sqrt{(r-r_A)(r_B-r)} dr = \frac{\pi}{2}(r_A+r_B) - \pi\sqrt{r_A r_B} \quad (3.80)$$

on trouve

$$\int_{r_A}^{r_B} K_n(r) dr = \pi \left[V_1 \sqrt{\frac{1}{-4E_N}} - \sqrt{l(l+1)} \right] \quad (3.81)$$

et en utilisant l'intégrale suivante :

$$\int_{r_A}^{r_B} \phi_0(r) \left[\frac{dK_0(r)}{dr} \right] \left[\frac{d\phi_0(r)}{dr} \right]^{-1} = \int_{r_A}^{r_B} K_0(r) dr \quad (3.82)$$

avec

$$\phi_0(r) = l(l+1)/r + V_1/2(l+1) \quad (3.83)$$

$$\int_{r_A}^{r_B} K_0(r) dr = \int_{r_A}^{r_B} \sqrt{(E_0 - (\frac{V_1}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}))} dr \quad (3.84)$$

$$= \int_{r_A}^{r_B} \frac{1}{r} \sqrt{-r^2 + \frac{V_1}{E_N} r + \frac{l(l+1)}{E_0}} dr \quad (3.85)$$

$$= \int_{r_A}^{r_B} \frac{1}{r} \sqrt{(r - r_A)(r_B - r)} dr \quad (3.86)$$

$$= \frac{\pi}{2}(r_A + r_B) - \pi\sqrt{r_A r_B} \quad (3.87)$$

$$\int_{r_A}^{r_B} K_0(r) dr = \frac{\pi}{2}(r_A + r_B) - \pi\sqrt{r_A r_B} \quad (3.88)$$

avec

$$E_0 = -V_1^2/4(l+1)^2 \quad (3.89)$$

on a

$$\int_{r_A}^{r_B} K_n(r) dr - \pi = \pi \left[V_1 \sqrt{\frac{1}{-4E_0}} - \sqrt{l(l+1)} - 1 \right] \quad (3.90)$$

On remplace (3.88) dans(3.90) cette équation,on trouve

$$\int_{r_A}^{r_B} \phi_0(r) \left[\frac{dK_0(r)}{dr} \right] \left[\frac{d\phi_0(r)}{dr} \right]^{-1} = \pi \left[l - \sqrt{l(l+1)} \right] \quad (3.91)$$

où

$$\int_{r_A}^{r_B} K(r) dr = (N+1)\pi + \int_{r_A}^{r_B} \phi_0(r) \left[\frac{dK_0(r)}{dr} \right] \left[\frac{d\phi_0(r)}{dr} \right]^{-1} \quad (3.92)$$

le specter d'énergie :

en remplace l'équation (3.81) et (3.91) dans (3.92),on obtient

$$\pi \left[V_1 \sqrt{\frac{1}{-4E_N}} - \sqrt{l(l+1)} \right] = (N+1)\pi + \pi \left[l - \sqrt{l(l+1)} \right] \quad (3.93)$$

finalemet en trouve

$$E_N = -\frac{V_1^2}{4(N+l+1)^2} \quad (3.94)$$

On remplace l'équation(3.70) dans l'équation (3.94),ce qui donne l'expression de l'énergie

$$E_{Nm} = -\frac{V_1^2}{4} \left[N + m + 1 + \left(\frac{1}{2}(m^2 + V_2) + \sqrt{(m^2 + V_2)^2 - V_3^2} \right)^{1/2} \right]^2 \quad (3.95)$$

ce qui correspond à l'énergie du potentiel de coulomb

3.2 L'oscillateur harmonique généralisé

Le potentiel total s'écrit :

$$V(r, \theta) = V_1 r^2 + \frac{V_2}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{V_3}{r^2 \cos^2 \theta} \quad (3.96)$$

$$\Delta \psi(r, \theta, \varphi) = -[E - V(\vec{r})] \psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.97)$$

avec

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} R(r) Y(\theta) e^{im\varphi} \quad (3.98)$$

séparation des variable

on peut appliquer la méthode de séparation des variables pour les potentiel de la forme suivant :

$$V(r, \theta) = U(r) + \frac{V_1(\theta)}{r^2} + \frac{V_2(\varphi)}{\sin^2 \theta} \quad (3.99)$$

$U(r)$: est la partie radial

V_1 et V_2 : sont des constantes positives

la séparation des variable de l'équation de Schrödinger :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] \psi(r, \theta, \varphi) = -[E - V(\vec{r})] \psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.100)$$

en remplaçant l'équation (3.98) dans l'équation (3.100), on obtient :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] \frac{1}{r} R(r) Y(\theta) e^{im\varphi} = -[E - V(\vec{r})] \frac{1}{r} R(r) Y(\theta) e^{im\varphi} \quad (3.101)$$

en multipliant r^2

$$r^2 \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] \frac{1}{r} R(r) Y(\theta) e^{im\varphi} = -r^2 [E - V(\vec{r})] \frac{1}{r} R(r) Y(\theta) e^{im\varphi} \quad (3.102)$$

en multipliant $\frac{r}{R(r)Y(\theta)e^{im\varphi}}$

$$\frac{r^2}{R(r)} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] R(r) + \frac{1}{Y(\theta)e^{im\varphi}} \left[\left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] Y(\theta)e^{im\varphi} = -r^2 [E - V(\vec{r})] \quad (3.103)$$

$$\frac{r^2}{R(r)} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] R(r) + \frac{1}{Y(\theta)e^{im\varphi}} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] Y(\theta)e^{im\varphi} + r^2 [E - V(\vec{r})] = 0 \quad (3.104)$$

On remplace l'équation (3.99) dans (3.104), on trouve :

$$\frac{r^2}{R(r)} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] R(r) + \frac{1}{Y(\theta)e^{im\varphi}} \left[\left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] Y(\theta)e^{im\varphi} + r^2 [E - V(\vec{r})] = 0 \quad (3.105)$$

$$\frac{r^2}{R(r)} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] R(r) + r^2 \left(E - \frac{V_1}{r} \right) - \frac{1}{Y(\theta)e^{im\varphi}} \left[\left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right] Y(\theta)e^{im\varphi} - E \frac{V_2 + V_3 \cos \theta}{\sin^2 \theta} = A \quad (3.106)$$

A : constante de séparation des variables.
on obtient les deux équations différentielles :

$$\frac{d^2}{dR(r)^2} + \left(E - V_1 r^2 - \frac{A}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (3.107)$$

on pose :

$$A = l(l+1) \quad (3.108)$$

l'équation différentielle radiale :

$$\frac{d^2}{dR(r)^2} + \left(E - V_1 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (3.109)$$

la partie angulaire

$$\left[\left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} - \left(\frac{V_2}{\sin^2 \theta} + \frac{V_3}{\cos^2 \theta} \right) - A \right] Y(\theta)e^{im\varphi} = 0 \quad (3.110)$$

en multipliant $\frac{\sin^2 \theta}{Y(\theta)e^{im\varphi}}$

$$\frac{\sin^2 \theta}{Y(\theta)} \left[\frac{d^2}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d}{d\theta} \right] Y(\theta) \left(\left(\frac{V_2}{\sin^2 \theta} + \frac{V_3}{\cos^2 \theta} \right) + A \right) \sin^2 \theta + \frac{1}{e^{im\varphi}} = 0 \quad (3.111)$$

alors

$$\frac{\sin^2 \theta}{Y(\theta)} \left[\frac{d^2}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d}{d\theta} \right] Y(\theta) + \left(-\frac{V_2}{\sin^2 \theta} - \frac{V_3}{\cos^2 \theta} + A \right) \sin^2 \theta - \frac{1}{e^{im\varphi}} = B^2 \quad (3.112)$$

l'équation différentielle angulaire :

en remplace $A = l(l+1)$ et $B^2 = m$ dans l'équation (3.112), on obtient :

$$\frac{d^2 Y(\theta)}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{dY(\theta)}{d\theta} + \left[l(l+1) - \frac{m^2 + V_2}{\sin^2 \theta} - \frac{V_3}{\cos^2 \theta} \right] Y(\theta) = 0 \quad (3.113)$$

$$\theta = \omega(x) \quad (3.114)$$

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} + \left(-\frac{\omega''}{\omega'} + \omega' \cot \omega \right) \frac{dY}{dx} + \left[l(l+1) - \frac{m^2 + V_2}{\sin^2 \omega} - \frac{V_3}{\cos^2 \omega} \right] Y = (m^2 + V_2) Y \quad (3.115)$$

a parti de l'équation de Schrödinger, on a :

$$-\frac{\omega''}{\omega'} + \omega' \cot \omega = 0 \quad (3.116)$$

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} + \cot \omega \frac{dY}{dx} \left[l(l+1) - \frac{m^2 + V_2}{\sin^2 \omega} - \frac{V_3}{\cos^2 \omega} \right] Y = 0 \quad (3.117)$$

donc

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} + [l(l+1) \operatorname{sech}^2 x - V_3 \operatorname{csech}^2 x] Y = (m^2 + V_2) Y \quad (3.118)$$

$$V_3 = \mu(\mu - 1) \quad (3.119)$$

la partie angulaire

En remplaçant l'équation (3.118) dans (3.119)

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} + [l(l+1)\operatorname{sech}^2 x - \mu(\mu-1)\operatorname{csech}^2 x]Y = (m^2 + V_2)Y \quad (3.120)$$

$$V_{eff}(x) = -l(l+1)\operatorname{sech}^2 x - \mu(\mu-1)\operatorname{csech}^2 x \quad (3.121)$$

où

$$y = \tanh^2(x) \quad (3.122)$$

$$y_A = \tanh^2(x_A) \quad (3.123)$$

et

$$y_B = \tanh^2(x_B) \quad (3.124)$$

$$V(x_A) = V(x_B) = E_n$$

$$E_n = -l(l+1)(1-y) + \mu(\mu-1)\left(\frac{1}{y} - 1\right) \quad (3.125)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} K_n(x)dx = \int_{y_A}^{y_B} \sqrt{(E_n + l(l+1)(1-y) - \mu(\mu-1)\left(\frac{1}{y} - 1\right))\frac{dy}{y}} \quad (3.126)$$

$$= \int_{y_A}^{y_B} \sqrt{\left(-y^2 + \left(1 + \frac{E_n + \mu(\mu-1)}{l(l+1)}\right)y - \frac{\mu(\mu-1)}{l(l+1)}\right)/y} \frac{dy}{y} \quad (3.127)$$

$$(3.128)$$

la solution de cette équation

$$-y^2 + \left(1 + \frac{E_n + \mu(\mu-1)}{l(l+1)}\right)y - \frac{\mu(\mu-1)}{l(l+1)} = 0$$

$$\Delta = \left(1 + \frac{E_n + \mu(\mu-1)}{l(l+1)}\right)^2 + 4\frac{\mu(\mu-1)}{l(l+1)}$$

les points tournants sont données comme suit

$$y_A = \frac{1}{2}\left[\left(1 + \frac{E_n + \mu(\mu-1)}{l(l+1)}\right) - \sqrt{\left(1 + \frac{E_n + \mu(\mu-1)}{l(l+1)}\right)^2 - 4\frac{\mu(\mu-1)}{l(l+1)}}\right] \quad (3.129)$$

et

$$y_B = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{E_n + \mu(\mu - 1)}{l(l + 1)} \right) + \sqrt{\left(1 + \frac{E_n + \mu(\mu - 1)}{l(l + 1)} \right)^2 - 4 \frac{\mu(\mu - 1)}{l(l + 1)}} \right] \quad (3.130)$$

la somme et la différence des points tournants :

$$y_A + y_B = 1 + \frac{E_n + \mu(\mu - 1)}{l(l + 1)} \quad (3.131)$$

$$y_A y_B = \frac{\mu(\mu - 1)}{l(l + 1)} \quad (3.132)$$

on utilise l'intégrale suivante :

$$\int_{y_A}^{y_B} \sqrt{(y - y_A)(y_B - y)} \frac{dy}{y} = \frac{\pi}{2} (y_1 + y_2) - \sqrt{y_1 y_2} \quad (3.133)$$

On remplace l'équation (3.129) et (3.130) dans (3.133), on trouve :

$$\int_{x_A}^{x_B} K_n(x) dx = \frac{\pi}{2} [\sqrt{-E_n} + \sqrt{l(l + 1)} - \sqrt{\mu(\mu - 1)}] \quad (3.134)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} \phi_0(x) \left[\frac{dK_0(x)}{dx} \right] \left[\frac{d\phi_0(x)}{dx} \right]^{-1} = \int_{x_A}^{x_B} K_0(x) dx - \pi \quad (3.135)$$

avec

$$\phi_0(x) = C_1/\sqrt{y} + C_2\sqrt{y} \quad (3.136)$$

où

$$\int_{x_A}^{x_B} K_n(x) dx = \int_{y_A}^{y_B} \sqrt{(E_0 + l(l + 1)(1 - y) - \mu(\mu - 1)\left(\frac{1}{y} - 1\right))} \frac{dy}{y} \quad (3.137)$$

$$= \int_{y_A}^{y_B} \sqrt{\left(-y^2 + \left(1 + \frac{E_0 + \mu(\mu - 1)}{l(l + 1)}\right)y - \frac{\mu(\mu - 1)}{l(l + 1)}\right)/y} \frac{dy}{y} \quad (3.138)$$

$$= \int_{y_A}^{y_B} \sqrt{(y - y_A)(y_B - y)} \frac{dy}{y} \quad (3.139)$$

$$= \frac{\pi}{2} (y_1 + y_2) - \sqrt{y_1 y_2} \quad (3.140)$$

$$= \frac{\pi}{2} [\sqrt{-E_0} + \sqrt{l(l + 1)} - \sqrt{\mu(\mu - 1)}] \quad (3.141)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} K_n(x) dx = \frac{\pi}{2} [\sqrt{-E_0} + \sqrt{l(l + 1)} - \sqrt{\mu(\mu - 1)}] \quad (3.142)$$

avec

$$E_0 = -(c_1 + c_2)^2 \quad (3.143)$$

On remplace l'équation (3.135) dans (3.142), on trouve :

$$\int_{x_A}^{x_B} \phi_0(x) \left[\frac{dK_0(x)}{dx} \right] \left[\frac{d\phi_0(x)}{dx} \right]^{-1} = \frac{\pi}{2} [(\mu - l - 2) - \sqrt{\mu(\mu - 1)} - \sqrt{l(l + 1)}] \quad (3.144)$$

On utilise l'équation (3.135) et (3.144), ce qui donne :

$$\frac{\pi}{2} \left[\frac{\pi}{2} [\sqrt{-E_n} + \sqrt{l(l + 1)} - \sqrt{\mu(\mu - 1)}] \right] = \frac{\pi}{2} \left[\frac{d\phi_0(x)}{dx} \right]^{-1} = \frac{\pi}{2} [(\mu - l - 2) - \sqrt{\mu(\mu - 1)} - \sqrt{l(l + 1)}] \quad (3.145)$$

donc, on montre facilement

$$E_{nl} = -(l - \mu - 2n)^2 \quad (3.146)$$

où

$$E_{nl} = -(m^2 + V_2)^2 \quad (3.147)$$

On utilise les deux équations (3.146) et (3.147)

$$-(l - \mu - 2n)^2 = -(m^2 + V_2)^2 \quad (3.148)$$

on obtient :

$$-(l - \mu - 2n)^2 = -(m^2 + V_2)^2 \quad (3.149)$$

alors

$$l = 2n + \mu + \sqrt{m^2 + V_2} \quad (3.150)$$

où

$$V_3 = \mu(\mu - 1) \quad (3.151)$$

la solution de cette équation

$$-\mu^2 + \mu + V_3 = 0 \quad (3.152)$$

donc

$$\mu = +\frac{1}{2} \sqrt{1/4 \pm V_3} \quad (3.153)$$

en remplaçant l'équation(3.153) dans (3.150), ce qui donne :

$$l = 2n + \sqrt{m^2 + V_2} + \frac{1}{2}\sqrt{1/4 \pm V_3} \quad (3.154)$$

l'équation radial :

A parti de l'équation de Schrödinger, après la séparation des variable, l'équation radiale est donnée par :

$$\frac{d^2}{dR(r)^2} + (E - V_1 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2})R(r) = 0 \quad (3.155)$$

le potentiel effective

$$V_{eff}(r) = V_1 r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (3.156)$$

alors

$$K_N(r) = \sqrt{E_N - V_{eff}(r)}$$

on calcule cette intégral

$$\int_{r_A}^{r_B} K_n(r) dr = \int_{r_A}^{r_B} \sqrt{E_N - V_1 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}} dr \quad (3.157)$$

$$= \sqrt{V_1} \int_{r_A}^{r_B} \sqrt{(-r^4 + \frac{E_N}{V_1} r^2 + \frac{l(l+1)}{V_1})/r} dr \quad (3.158)$$

$$= \sqrt{V_1} \int_{r_A}^{r_B} \frac{1}{r} \sqrt{-r^4 + \frac{E_N}{V_1} r^2 + \frac{l(l+1)}{V_1}} dr \quad (3.159)$$

la solution de cette équation

$$-r^4 + \frac{E_N}{V_1} r^2 - \frac{l(l+1)}{V_1} = 0$$

Nous allons calculer Δ

$$\Delta = (\frac{E_N}{V_1})^2 + 4 \frac{l(l+1)}{V_1}$$

et on calcule les points tournants:

$$r_A^2 = \frac{1}{2}[-\frac{E_N}{V_1} - \sqrt{(\frac{E_N}{V_1})^2 + 4 \frac{l(l+1)}{V_1}}] \quad (3.160)$$

et

$$r_B^2 = \frac{1}{2}[-\frac{E_N}{V_1} + \sqrt{(\frac{E_N}{V_1})^2 + 4 \frac{l(l+1)}{V_1}}] \quad (3.161)$$

Et finalement, on trouve:

$$r_A = \sqrt{\frac{1}{2}\left[-\frac{E_N}{V_1} + \sqrt{\left(\frac{E_N}{V_1}\right)^2 + 4\frac{l(l+1)}{V_1}}\right]} \quad (3.162)$$

Et

$$r_B = \sqrt{\frac{1}{2}\left[-\frac{E_N}{V_1} + \sqrt{\left(\frac{E_N}{V_1}\right)^2 + 4\frac{l(l+1)}{V_1}}\right]} \quad (3.163)$$

D'où, par la simplification de la somme de ces points, on trouve :

$$r_A^2 + r_B^2 = \frac{E_N}{V_1} \quad (3.164)$$

Et aussi pour le produit de ces points, on trouve:

$$r_A^2 r_B^2 = \frac{l(l+1)}{V_1} \quad (3.165)$$

on va utiliser l'integrale suivante :

$$\int_{r_A}^{r_B} \frac{1}{r} \sqrt{-r^4 + (r_A^2 + r_B^2)r + r_A^2 r_B^2} dr = \frac{\pi}{2}(r_A^2 + r_B^2) + \pi\sqrt{r_A^2 r_B^2} \quad (3.166)$$

en remplaçant l'équation (3.164)(3.165) dans(3.166), on trouve

$$\int_{r_A}^{r_B} K_n(r) dr = \frac{\pi}{2} \left[\frac{E_N}{\sqrt{4V_1}} - \sqrt{l(l+1)} \right] \quad (3.167)$$

$$\int_{r_A}^{r_B} \phi(r) \left[\frac{dK(r)}{dr} \right] \left[\frac{d\phi(r)}{dr} \right]^{-1} = \int_{r_A}^{r_B} K(r) dr - \pi \quad (3.168)$$

et en remplaçant l'équation (3.167) dans (3.168)

$$\int_{r_A}^{r_B} K_0(r) dr = \int_{r_A}^{r_B} \sqrt{E_0 - V_1 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}} dr \quad (3.169)$$

$$= \sqrt{V_1} \int_{r_A}^{r_B} \sqrt{\left(-r^4 + \frac{E_0}{V_1} r^2 + \frac{l(l+1)}{V_1}\right)/r} dr \quad (3.170)$$

$$= \sqrt{V_1} \int_{r_A}^{r_B} \frac{1}{r} \sqrt{-r^4 + \frac{E_0}{V_1} r^2 + \frac{l(l+1)}{V_1}} dr \quad (3.171)$$

$$= \int_{r_A}^{r_B} \frac{1}{r} \sqrt{-r^4 + (r_A^2 + r_B^2)r + r_A^2 r_B^2} dr \quad (3.172)$$

$$= \frac{\pi}{2}(r_A^2 + r_B^2) + \pi\sqrt{r_A^2 r_B^2} \quad (3.173)$$

$$= \frac{\pi}{2} \left[\frac{E_N}{\sqrt{4V_1}} - \sqrt{l(l+1)} \right] \quad (3.174)$$

$$\int_{r_A}^{r_B} K_0(r)dr = \frac{\pi}{2} \left[\frac{E_N}{\sqrt{4V_1}} - \sqrt{l(l+1)} \right] \quad (3.175)$$

On remplace l'équation (3.175) dans (3.168), on obtient :

$$\int_{r_A}^{r_B} \phi(r) \left[\frac{dK(r)}{dr} \right] \left[\frac{d\phi(r)}{dr} \right]^{-1} dr = \frac{\pi}{2} \left[l - \sqrt{l(l+1)} - \frac{1}{2} \right] \quad (3.176)$$

$$\int_{r_A}^{r_B} K_N(r)dr = (N+1)\pi + \int_{r_A}^{r_B} \phi(r) \left[\frac{dK(r)}{dr} \right] \left[\frac{d\phi(r)}{dr} \right]^{-1} dr \quad (3.177)$$

le spectre de l'énergie

$$\frac{\pi}{2} \left[\frac{E_N}{\sqrt{4V_1}} - \sqrt{l(l+1)} \right] = (N+1)\pi + \frac{\pi}{2} \left[l - \sqrt{l(l+1)} - \frac{1}{2} \right] \quad (3.178)$$

après le calcul, on trouve le spectre de l'énergie donnée par la formule :

$$E_N = (2N + l + 3/2)\sqrt{4V_1} \quad (3.179)$$

$$l = 2n + \sqrt{m^2 + V_2} + \left[\frac{1}{2} \pm \sqrt{1/4 + V_3} \right] \quad (3.180)$$

$$E_{Nnm} = \sqrt{4V_1} [2N + 2n + 2 \pm \sqrt{1/4 + V_3} + \sqrt{m^2 + V_2}] \quad (3.181)$$

3.3 L'atome d'hydrogène

Le potentiel de l'atome d'hydrogène est donné par :

$$U_l(r) = l(l+1)\hbar^2/(2Mr^2) - e^2/r \quad (3.182)$$

$$K_{nl}(r) = \sqrt{2M(E_{nl} - V(r))}/\hbar \quad (3.183)$$

$$U_l(r_A) = U_l(r_B) = E_{nl}$$

$$\int_{r_A}^{r_B} K_{nl}(r)dr = \int_{r_A}^{r_B} \sqrt{2M(E_{nl} - l(l+1)\hbar^2/(2Mr^2) + e^2/r)}/\hbar dr \quad (3.184)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \int_{r_A}^{r_B} \frac{1}{r} \sqrt{-2ME_{nl}(-r^2 - \frac{e^2}{E_{nl}}r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2ME_{nl}})} dr \quad (3.185)$$

$$(3.186)$$

la solution de cette équation

$$-r^2 - \frac{e^2}{E_{nl}}r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2ME_{nl}} = 0$$

on cherche les solutions de cette équation, nous avons:

$$\Delta = \left(\frac{e^2}{E_{nl}}\right)^2 - 4\frac{l(l+1)\hbar^2}{2ME_{nl}}$$

donc, il existe deux solutions:

$$r_A = (-2E_{nl})^2[e^2 - (e^4 + 2l(l+1)\hbar^2 E_{nl}/M)]^{1/2} \quad (3.187)$$

et

$$r_B = (-2E_{nl})^2[e^2 + (e^4 + 2l(l+1)\hbar^2 E_{nl}/M)]^{1/2} \quad (3.188)$$

D'où, la somme de ces points va être comme suit :

$$r_A + r_B = \frac{e^2}{E_{nl}} \quad (3.189)$$

Et ceci par la simplification de la somme de ces points, et aussi le produit, va être sous la forme suivante :

$$r_A r_B = \frac{l(l+1)\hbar^2}{-2ME_{nl}} \quad (3.190)$$

On utilise l'intégrale suivante :

$$\int_{r_A}^{r_B} \frac{1}{r} \sqrt{(r-r_A)(r_B-r)} dr = \frac{\pi}{2}(r_A+r_B) - \pi\sqrt{r_A r_B} \quad (3.191)$$

On remplace l'équation (3.187) et (3.188) dans (3.191), on obtient :

$$\int_{r_A}^{r_B} K_{nl}(r) dr = \left[\frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{M}{-2ME_{nl}}} - \sqrt{l(l+1)} \right] \pi \quad (3.192)$$

$$\int_{r_A}^{r_B} K_{nl}(r) dr = [n - \sqrt{l(l+1)}] \pi \quad (3.193)$$

$$\int_{r_A}^{r_B} \phi_{nl}(r) \left[\frac{dK_{nl}(r)}{dr} \right] \left[\frac{d\phi_{nl}(r)}{dr} \right]^{-1} = \int_{r_A}^{r_B} K_{nl}(r) dr - \pi \quad (3.194)$$

avec

$$\phi_{nl}(r) = (l+1)/r - Me^2/[(l+1)\hbar^2] \quad (3.195)$$

en remplace l'équation (3.195) dans (3.194) :

$$\int_{r_A}^{r_B} \phi_{nl}(r) \left[\frac{dK_{nl}(r)}{dr} \right] \left[\frac{d\phi_{nl}(r)}{dr} \right]^{-1} = \left[\frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{M}{-2ME_{nl}}} - \sqrt{l(l+1)} \right] \pi - \pi \quad (3.196)$$

avec

$$E_{nl} = -Me^4/[2(l+1)^2\hbar^2] \quad (3.197)$$

$$\int_{r_A}^{r_B} \phi_{nl}(r) \left[\frac{dK_{nl}(r)}{dr} \right] \left[\frac{d\phi_{nl}(r)}{dr} \right]^{-1} = [l - \sqrt{l(l+1)}] \pi \quad (3.198)$$

le spectre d'énergie :

On utilise les équations (3.192) et (3.197), ce qui donne :

$$\left[\frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{M}{-2ME_{nl}}} - \sqrt{l(l+1)} \right] \pi = [n - \sqrt{l(l+1)}] \pi \quad (3.199)$$

on trouve :

$$E_{nl} = -Me^4/2n^2\hbar^2 \quad (3.200)$$

Conclusion

Dans ce travail, nous avons exposé une nouvelle règle de quantification exacte qui a été développée par Ma-Xu, pour résoudre l'équation de Schrödinger.

Le premier chapitre a été consacré aux rappels de quelques notions fondamentales sur l'équation de Schrödinger ainsi que la quantification de l'énergie. Dans le deuxième chapitre, en particulier, on s'est intéressé à la présentation de la technique de la règle de quantification et à la fin du chapitre on a appliqué cette méthode sur l'oscillateur harmonique à une dimension. Dans le troisième chapitre, nous avons mis l'accent sur l'application de la méthode pour le cas tridimensionnel.

La méthode de Ma-Xu nous a permis de trouver les solutions de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Coulomb généralisé, l'oscillateur harmonique généralisé ainsi que pour l'atome d'hydrogène. Cette méthode permet la détermination du spectre d'énergie, sans passer par la résolution de l'équation de Schrödinger. L'avantage de cette méthode est sa simplicité et efficacité lors de son application.

Parmi les perspectives de ce présent mémoire, on se propose de généraliser cette règle de quantification sur tous les potentiels et de trouver une technique comment déterminer les fonctions propres correspondantes.

Annex : Intégrales usuelles

Quelques intégrales usuelles utiles [10] :

$$\int_{x_A}^{x_B} \frac{dx}{\sqrt{(x-x_A)(x_B-x)}} = \pi \quad (3.201)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} \frac{x}{\sqrt{(x-x_A)(x_B-x)}} dx = \frac{\pi}{2} \sqrt{x_A + x_B} \quad (3.202)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} \frac{dx}{x\sqrt{(x-x_A)(x_B-x)}} = \frac{\pi}{x_A x_B} \quad (3.203)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} \frac{dx}{x} \sqrt{(x-x_A)(x_B-x)} = \frac{\pi}{2}(x_A + x_B) - \pi\sqrt{x_A x_B} \quad (3.204)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} \sqrt{(x-x_A)(x_B-x)} dx = \frac{\pi}{8}(x_B - x_A)^2 \quad (3.205)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} x\sqrt{(x-x_A)/(x_B-x)} dx = \frac{\pi}{8}(x_B - x_A)(x_A + 3x_B) \quad (3.206)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} x\sqrt{(x_B-x)/(x-x_A)} dx = \frac{\pi}{2}(x_B - x_A)(3x_A + x_B) \quad (3.207)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} \frac{dx}{1+x^2} \sqrt{(x-x_A)(x_B-x)} = -\pi + \sqrt{x_A x_B + \sqrt{(1+x_A^2)(1+x_B^2)}} \quad (3.208)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} \frac{dx}{(a+bx)\sqrt{(x-x_A)(x_B-x)}} = \frac{\pi}{\sqrt{(a+bx_A)(a+bx_B)}} \quad (3.209)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} \frac{1}{x}\sqrt{(x-x_A)(x_B-x)}dx = \frac{\pi}{2}(x_A^2+x_B^2) - \pi\sqrt{x_A^2x_B^2} \quad (3.210)$$

$$\int_{x_A}^{x_B} \frac{\sqrt{ax^2+bx+c}}{x}dx = \sqrt{ax^2+bx+c} + \frac{b}{2}\left[-\frac{1}{\sqrt{-a}}\arcsin\left(\frac{2ax+b}{\sqrt{b^2-4ac}}\right)\right] + c\left[\frac{1}{\sqrt{-c}}\arcsin\left(\frac{bx+2c}{x\sqrt{b^2-4ac}}\right)\right] \quad (3.211)$$

Bibliographie

- [1] F. L. Claud Cohen Tannoudji, Bernard Diu, *Mécanique Quantique*, Hermann editeur des sciences et des arts edition.
- [2] F. Schwabl, *Quantum Mechanics*, Fourth edition.
- [3] W.-C. Qiang and S.-H. Dong, A Letters Journal Exploring (2010).
- [4] X.-Y. G. F.A. Serrano and S.-H. Dong, Journal of Mathematical Physics (2010).
- [5] C. Aslangul, *Mécanique quantique*, 2007.
- [6] R. W. Robinett, *Quantum Mechanics*, Second edition, 2002.
- [7] M. C. Jean Hladik, *Introduction à la mécanique quantique*, 2000.
- [8] F. Schwabl, *Quantum Mechanics*, 2007.
- [9] M. Z. Xiao-Yan Gu and J.-Q. Sun, Modern Physics Letters B (2010).
- [10] S.-H. Dong, *Wave Equations in Higher Dimension*, 2011.
- [11] D. M. Shi-Hai Dong and J. G. Ravelo, International Journal of Modern Physics E (2007).

résumé

Dans ce travail, on expose une nouvelle méthode de quantification exacte, développée par Ma-Xu, ces dernières années.

La méthode de Ma-Xu nous permet de trouver les solutions de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Coulomb généralisé, l'oscillateur harmonique généralisé ainsi que pour l'atome d'hydrogène. Cette méthode permet la détermination du spectre d'énergie, sans avoir nécessité de la résolution de l'équation de Schrödinger elle-même.

L'avantage de cette méthode est sa simplicité et efficacité lors de son application.

Mots clés : Méthode de quantification de Ma-XU, Equation de Schrödinger, Potentiel de Coulomb généralisé, Potentiel harmonique généralisé, Atome d'hydrogène.

Abstract

In this work, we show a new method of exact quantification, developed in recent years by Ma-Xu.

Ma-Xu's method allows us to find the solution of the Schrödinger equation with generalised Coulomb potential, generalised harmonic oscillator and the hydrogen atom. In fact, this method enables the determination of energy spectra without solving the Schrödinger equation itself.

The benefit of this approach is the simplicity and its efficiency when applying it.

Keywords: Ma-Xu's quantification method, Schrödinger equation, generalized Coulomb potential, generalized harmonic oscillator, hydrogen atom.

ملخص:

في هذه المذكرة نكشف عن طريقة جديدة للعد الدقيق , طورها ماي و قزو , في السنوات الأخيرة .

سمحت لنا طريقة ماي و قزو بالعثور علي حلول معادلة شرود نجر مع كمون كولوم المعمم , لنواس التوافقي المعمم و ذرة الهيدروجين .

سمحت هذه الطريقة بتحد يد طيف الطاقة , دون الحاجة إلى حل معادلة شرود نجر نفسها , إيجابية هذه الطريقة هي بساطتها وكفاءتها أثناء تطبيقها .

كلمات مفتاحيه:

طريقة القياس الكمي ل ماي و قزو , معادلة شرود نجر , كمون كولوم المعممة , النواس التوافقي المعمم , ذرة الهيدروجين .