



République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Université A.Mira Béjaïa  
Faculté des Sciences Exactes  
Département de Physique

**Mémoire de Master**

*présenté par*

**Mr HARFI Nabil**

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

*Spécialité : Physique Théorique*

Intitulé

---

# Sur la Théorie de la variable action quantique

---

soutenu le 19/06/2013, devant le jury composé de :

Mr. KHODJA Lamine	Président	MCB	UAMB
Mr. BELABBAS Abdelmoumene	Examineur	MAB	UAMB
Mr. GHARBI Abdelhakim	Rapporteur	MCB	UAMB

# Remerciements

Je remercie tout d'abord Dieu de m'avoir aidé à réaliser ce modeste travail.

Je tiens à remercier monsieur A.Gharbi d'avoir accepté de m'encadrer pour ce mémoire de Master, pour son aide et ses conseils durant cette période.

J'exprime ma profonde gratitude aux membres du jury, ainsi qu'à tous les enseignants qui ont contribué à ma formation.

Je tiens également à remercier mes parents, mes frères, mes cousins et moumouche un peu plus, pour leurs soutiens et leurs encouragements tout au long de ces nombreuses années d'études.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Théorie de Hamilton-Jacobi Classique</b>	<b>4</b>
2.1	Les crochets de Poisson . . . . .	4
2.2	Transformations canoniques en mécanique classique . . . . .	5
2.2.1	Les équations de transformations canoniques . . . . .	5
2.3	Théorie de Hamilton-Jacobi classique . . . . .	6
2.4	Les variables action-angle . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Théorie de Hamilton-Jacobi Quantique</b>	<b>11</b>
3.1	Equation de Hamilton-Jacobi quantique . . . . .	11
3.2	La variable action quantique . . . . .	14
3.3	Exemple d'illustration : Oscillateur harmonique à 1D . . . . .	15
<b>4</b>	<b>Application à quelques potentiels à une dimension</b>	<b>18</b>
4.1	Oscillateur barrière . . . . .	18
4.2	Barrière coulombienne . . . . .	23
4.3	Oscillateur harmonique sur une demi-ligne . . . . .	26
4.4	Potentiel d'Eckart . . . . .	30
<b>5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>35</b>

# Chapitre 1

## Introduction

En mécanique classique, il existe de nombreuses formulations pour étudier un système physique, on peut citer la méthode de Lagrange, de Hamilton, les crochets de Poisson et le formalisme de Hamilton-Jacobi[1] [2]. Les formalismes les plus utilisés sont les deux premiers (lagrangien, hamiltonien). Le formalisme de Hamilton-Jacobi est une formulation moins utilisée par rapport aux deux premières car on ne l'utilise généralement que pour les systèmes qui ont un mouvement périodique. Il est important de signaler que toutes ces formulations conduisent aux mêmes solutions pour un problème donné, sauf que ces solutions peuvent être plus faciles à obtenir dans un formalisme par rapport à un autre.

En mécanique quantique, l'étude des potentiels a attiré beaucoup d'attention depuis son avènement. En effet, la résolution de l'équation Schrödinger est une étape fondamentale et nécessaire dans l'étude et la compréhension des propriétés physiques de tout système quantique. De ce fait plusieurs méthodes ont été développées afin d'obtenir les spectres d'énergie des systèmes physiques. La plupart de ces méthodes peuvent être classées dans deux grandes familles [3] :

La première renferme les méthodes analytiques [4], elle consiste à résoudre l'équation différentielle du second ordre pour obtenir la solution du problème. Cela peut être réalisé en transformant l'équation de Schrödinger en une équation différentielle ordinaire bien connue.

La deuxième classe comprend les méthodes algébriques qui peuvent être réalisées à partir de concepts algébriques. Parmi ces méthodes on peut citer la méthode de factorisation, la mécanique quantique supersymétrique, la méthode de la théorie des groupes....etc

En 1983, Leacock et Padgett présentent une méthode de quantification exacte qui permet l'obtention des niveaux d'énergie d'un système quantique sans résoudre l'équation de Schrödinger. Ceci est rendu possible par l'introduction de la variable action quantique dans le cadre d'une version quantique du formalisme de Hamilton-Jacobi.

L'objet de notre travail est de présenter succinctement cette méthode et de l'appliquer sur quelques potentiels stationnaires à une dimension .

Ce mémoire sera organisé comme suit : après une brève introduction, le deuxième chapitre sera consacré à un rappel sur la théorie de Hamilton-Jacobi classique. Le troisième chapitre sera dévoué au formalisme de Hamilton-Jacobi quantique (théorie de la variable action quantique) où la condition de quantification exacte sera présentée suivie d'un exemple d'illustration de la méthode avec l'oscillateur harmonique à une dimension. Dans le quatrième chapitre une application de la méthode sera effectuée sur quelques potentiels à 1D. Dans la conclusion une discussion des résultats sera menée.

# Chapitre 2

## Théorie de Hamilton-Jacobi Classique

Avant de présenter le formalisme de Hamilton-Jacobi quantique, on va rappeler brièvement le formalisme de Hamilton-Jacobi classique. Pour cela on doit d'abord introduire les crochets de Poisson ainsi que les transformations canoniques.

### 2.1 Les crochets de Poisson

On considère deux fonctions de l'espace des phases  $A$  et  $B$ . En mécanique hamiltonienne, Le crochet de Poisson de ces deux fonctions est défini par [5] :

$$\{A(q_i, p_i), B(q_i, p_i)\} = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right\} \quad (2.1)$$

où les  $2N$  variables canoniques sont :

- les  $N$  coordonnées généralisées  $\{q_i\}_{i=1, \dots, N}$ .
- les  $N$  moments conjugués  $\{p_i\}_{i=1, \dots, N}$ .

En se basant sur cette définition, on peut construire des crochets dits fondamentaux, et ceci en remplaçant les fonctions  $A$  et  $B$  par les variables  $q_i$  et  $p_i$ . On obtient alors les relations suivantes [1]

$$\{p_i, p_j\} = \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{\partial p_i}{\partial q_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial p_j}{\partial p_k} \frac{\partial p_i}{\partial q_k} \right\} \quad (2.2)$$

$$\{q_i, q_j\} = 0 \quad (2.3)$$

$$\{q_i, p_j\} = \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial p_j}{\partial p_k} \frac{\partial q_i}{\partial q_k} \right\} = \sum_{k=1}^N \delta_{ik} \delta_{jk} = \delta_{ij} \quad (2.4)$$

## 2.2 Transformations canoniques en mécanique classique

En mécanique hamiltonienne, on appelle transformation canonique toute transformation de coordonnées et d'impulsions généralisées  $(p, q) \longrightarrow (P, Q)$  pour laquelle les crochets de Poisson fondamentaux sont préservés. Autrement dit, toute transformation qui conserve les équations de mouvement.

### 2.2.1 Les équations de transformations canoniques

On considère un système déterminé par les coordonnées et les impulsions généralisés  $(q_1, \dots, q_n), (p_1, \dots, p_n)$ . On va étudier ce système en utilisant les nouvelles coordonnées et impulsions généralisées  $(Q_1, \dots, Q_n), (P_1, \dots, P_n)$ , reliées aux anciennes coordonnées par les transformations suivantes [5] :

$$Q_1 = Q_1(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n, t), \quad Q_n = Q_n(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n, t) \quad (2.5)$$

$$P_1 = P_1(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n, t), \quad P_n = P_n(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n, t)$$

$$q_1 = q_1(Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n, t), \quad q_n = q_n(Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n, t)$$

$$p_1 = p_1(Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n, t), \quad p_n = p_n(Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n, t)$$

on dit que ces transformations sont canonique si les équations de mouvements dans le nouveau espace des phases ont la forme [5] :

$$\frac{\partial Q_1}{\partial t} = \frac{\partial K}{\partial P_1}, \quad \frac{\partial Q_n}{\partial t} = \frac{\partial K}{\partial P_n} \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} = -\frac{\partial K}{\partial Q_1}, \quad \frac{\partial P_n}{\partial t} = -\frac{\partial K}{\partial Q_n} \quad (2.7)$$

où  $K(Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n)$  est l'hamiltonien transformé

L'intérêt des nouvelles variables du nouvel hamiltonien est d'utiliser les outils les plus simples pour une description plus simple ( c'est le but de tout changement de variables).

## 2.3 Théorie de Hamilton-Jacobi classique

La théorie de Hamilton-Jacobi est un formalisme bien développé en mécanique classique. Ce dernier fournit une méthode puissante pour la résolution des équations dynamiques. Celle-ci est basée essentiellement sur le passage entre les anciennes coordonnées canoniques  $(q_i, p_i)$  et les nouvelles coordonnées canoniques  $(Q_i, P_i)$  via une transformation canonique suivant ces équations [6]

$$q_i = q_i(Q_i, P_i, t_0) \quad , \quad p_i = p_i(Q_i, P_i, t_0) \quad (2.8)$$

On passe des anciennes coordonnées  $(q_i, p_i)$  au nouvelles coordonnées  $(Q_i, P_i)$  à l'aide d'une fonction appelée fonction génératrice, il existe quatre types de fonctions génératrices et le choix se fait comme suit :

- Si les couples choisies sont  $(q_k, Q_k)$ , la génératrice est de type et 1 elle est notée

$$F = F_1(q_k, Q_k, t)$$

- Si les couples choisies sont  $(q_k, P_k)$ , la génératrice est de type et 2 elle est notée

$$F = F_2(q_k, P_k, t)$$

- Si les couples choisies sont  $(p_k, Q_k)$ , la génératrice est de type et 3 elle est notée

$$F = F_3(p_k, Q_k, t)$$

- Si les couples choisies sont  $(p_k, P_k)$ , la génératrice est de type et 4 elle est notée

$$F = F_4(p_k, P_k, t)$$

Dans notre travail nous allons choisir le couple  $(q_i, P_i)$ . Donc, nous allons considérer une fonction génératrice  $F(q_i; P_i, t)$  de type 2. Dans ce cas, l'hamiltonien transformé  $K$  s'écrit en terme de l'ancien hamiltonien  $H$  et de la fonction génératrice  $F$  comme

$$K = H + \frac{\partial F(q_i; P_i, t)}{\partial t} \quad (2.9)$$

Si on se place dans la situation où  $K = 0$ , les équations de mouvement deviennent

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t} = \frac{\partial K}{\partial P_i} = 0 \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0 \quad (2.11)$$

et la relation (2.9) se réduit à

$$H = -\frac{\partial F(q_i; P_i, t)}{\partial t} \quad (2.12)$$

ainsi, les équations de transformation en terme de la fonction génératrice seront données par

$$p_i = \frac{\partial F(q_i; P_i, t)}{\partial q_i} \quad (2.13)$$

$$Q_i = \frac{\partial F(q_i; P_i, t)}{\partial P_i} \quad (2.14)$$

ceci permet de réécrire la relation (2.12) sous la forme suivante

$$H\left(q_i, \frac{\partial F(q_i; P_i, t)}{\partial q_i}, t\right) + \frac{\partial F(q_i; P_i, t)}{\partial t} = 0 \quad (2.15)$$

Cette dernière équation est connue sous le nom de "l'équation de Hamilton-Jacobi"[2]. Elle est obtenue lorsque on annule l'hamiltonien transformé. C'est une équation aux dérivées partielles de  $F(q_i, P_i, t)$ . Sa solution est dite "fonction principale de Hamilton". Elle est notée  $S$  et elle dépend des constantes d'intégration  $\alpha_i$ . On écrit alors

$$F \equiv S(q_i, \alpha_i, t) \quad (2.16)$$

selon la relation (2.11), on peut obtenir comme constantes d'intégration les  $P_i$ , c'est-à-dire,  $\alpha_i = P_i$ . Ainsi l'équation de transformation des impulsions généralisées (2.13) prendra la forme

$$p_i = \frac{\partial S(q_i, \alpha_i, t)}{\partial q_i} \quad (2.17)$$

et la nouvelle coordonnée  $Q_i$  compte tenu (2.13) et (2.14) s'écrira

$$Q_i = \frac{\partial S(q_i, \alpha_i, t)}{\partial \alpha_i} = \beta_i \quad (2.18)$$

où les  $\beta_i$  sont des constantes.

En utilisant les conditions initiales, on obtient les coordonnées  $(q_i, p_i)$  en fonction des constantes d'intégration  $(\alpha_i, \beta_i)$ .

$$q_i = q_i(\alpha_i, \beta_i, t), \quad p_i = p_i(\alpha_i, \beta_i, t) \quad (2.19)$$

Lors de la résolution de l'équation de Hamilton-Jacobi, on obtient non seulement la fonction génératrice de la transformation canonique mais également la solution du problème physique.

Lorsque  $H$  ne dépend pas explicitement du temps l'équation (2.15) prend la forme

$$H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (2.20)$$

où le premier terme dépend des  $q_i$  et le deuxième terme dépend du temps. Par conséquent, on peut écrire la solution sous la forme

$$S(q_i, \alpha_i, t) = W(q_i, \alpha_i) - \alpha_1 t \quad (2.21)$$

où  $W$  est dite fonction caractéristique de Hamilton.

En remplaçant  $S$  dans l'équation de Hamilton-Jacobi (2.20), on obtient une équation en terme de la fonction caractéristique (équation de Hamilton-Jacobi de la fonction caractéristique) qui s'écrit comme suit

$$H\left(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}\right) = \alpha_1 \quad (2.22)$$

les équations de transformation (2.17) et (2.18) en terme de  $W$  auront la forme suivante

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i} \quad (2.23)$$

$$Q_i = \frac{\partial W}{\partial P_i} = \frac{\partial W}{\partial \alpha_i} \quad (2.24)$$

où  $H$  et  $K$  sont indépendants du temps. A partir de l'expression (2.9), on obtient

$$K = \alpha_1 \quad (2.25)$$

ainsi les équations du mouvement pour les coordonnées  $p_i$  seront

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0 \quad (2.26)$$

avec des solutions  $P_i = \alpha_i$ .

et pour les coordonnées  $Q_i$ , elles seront

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t} = \frac{\partial K}{\partial \alpha_i} = 1 \text{ pour } i = 1 \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t} = \frac{\partial K}{\partial \alpha_i} = 0 \text{ pour } i \neq 1 \quad (2.28)$$

avec les solutions

$$Q_1 = t + \beta_1 \equiv \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} \text{ pour } i = 1 \quad (2.29)$$

$$Q_i = \beta_i \equiv \frac{\partial W}{\partial \alpha_i} \text{ pour } i \neq 1 \quad (2.30)$$

De l'équation ci-dessus, nous remarquons qu'il y a seulement  $Q_1$  qui n'est pas une constante (elle est en fonction du temps). Ainsi l'équation de Hamilton-Jacobi peut être résolue pour les systèmes dont  $H$  est indépendant du temps.

## 2.4 Les variables action-angle

Les variables Action-angle sont obtenues à partir d'une transformation canonique de type 2. On peut traiter les systèmes qui ont un mouvement périodique en utilisant ces variables.

On définit la variable d'action  $J$  en fonction de l'impulsion  $p$  comme suit [1], [8]

$$J = \oint pdq \quad (2.31)$$

où l'on intègre sur une période complète du mouvement dans l'espace des phases. On écrit la fonction caractéristique de Hamilton  $W$  en fonction de la variable d'action  $J$  comme suit

$$W = W(q, J) \quad (2.32)$$

le conjugué de  $J$  est connu sous le nom de la variable angle (on la note  $\omega$ ), on la définit par

$$\omega = \frac{\partial W}{\partial J} \quad (2.33)$$

l'équation de mouvement en terme de la nouvelle variable  $\omega$  sera donnée par

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = \frac{\partial H(J)}{\partial J} \equiv v \quad (2.34)$$

et la solution prendra la forme

$$\omega = vt + \beta \quad (2.35)$$

où  $v$  représente la fréquence.

Finalement, on est arrivé à obtenir la fréquence d'un système en mouvement périodique sans passer par la résolution des équations de mouvement. A partir de ces équations, on peut trouver  $q$  en fonction de  $w$  et  $J$  comme on peut trouver aussi la période du mouvement  $T$ [8].

# Chapitre 3

## Théorie de Hamilton-Jacobi Quantique

La théorie Hamilton-Jacobi classique fournit un outil efficace pour étudier les systèmes décrivant un mouvement périodique. En effet, dans ce formalisme on peut remonter aux fréquences propre du mouvement par l'introduction des variables action-angle sans résoudre intégralement les équations de mouvement. Padgett et Leacock se sont inspiré de cette méthode pour construire un nouveau formalisme en mécanique quantique. Ce dernier conduit au spectre d'énergie d'un système dans un état lié sans résoudre l'équation de Schrödinger. Ils ont suivi une démarche analogue à la théorie classique, autrement dit, ils ont introduit une variable action quantique qui est le vis-à-vis de la variable action en mécanique classique. Le point de départ de cette théorie est le postulat d'une équation dite l'équation de Hamilton-Jacobi quantique qui ne diffère de la version classique que par un terme proportionnel à la constante de Planck  $\hbar$ .

### 3.1 Equation de Hamilton-Jacobi quantique

Pour un système stationnaire à une dimension, Padgett et Leacock ont postulé que l'équation de Hamilton-Jacobi quantique est de la forme [7]

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2 W(x, E)}{\partial x^2} + \left( \frac{\partial W(x, E)}{\partial x} \right)^2 = 2\mu [E - V(x)] \quad (3.1)$$

où  $E$  est l'énergie de la particule,  $W$  est la fonction caractéristique quantique (action réduite) et  $\mu$  est la masse de la particule. Cette équation est obtenue à partir de l'équation de Schrödinger

en effectuant une transformation sur la fonction d'onde  $\Psi(x)$ . Cela se fait comme suit

On considère l'équation de Schrödinger [8]

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (3.2)$$

on pose

$$\Psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right) \quad (3.3)$$

en remplaçant (3.3) dans (3.2), on obtient

$$\left[ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2 W(x, E)}{\partial x^2} + \left( \frac{\partial W(x, E)}{\partial x} \right)^2 \right] \exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right) = 2\mu [E - V(x)] \exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right) \quad (3.4)$$

Après simplification, on obtient l'équation de Hamilton-Jacobi quantique donnée par (3.1).

Maintenant on introduit une nouvelle grandeur  $p$  qu'on appellera LA FONCTION MOMENT QUANTIQUE et qu'on définira par [9]

$$p(x, E) = \frac{\partial W(x, E)}{\partial x} \quad (3.5)$$

où  $W$  est la fonction caractéristique quantique (action réduite).

en tenant compte de (3.5), l'équation (3.1) prend la forme

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + p^2(x, E) = 2\mu [E - V(x)] \quad (3.6)$$

selon l'équation précédente, on remarque que lorsque  $\hbar \rightarrow 0$  la fonction moment quantique se réduit à

$$p(x, E) \rightarrow \sqrt{2\mu [E - V(x)]} = p_c(x, E) \quad (3.7)$$

où  $p_c$  est la fonction moment classique. La relation précédente représente une condition aux limites. Ainsi, on peut écrire l'équation (3.6) comme suit

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + p^2(x, E) = 2\mu [E - V(x)] = p_c^2(x, E) \quad (3.8)$$

maintenant nous allons essayer de retrouver la relation entre  $p(x; E)$  et  $\Psi(x)$ . on a

$$\Psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right) \iff W(x, E) = -i\hbar \ln(\Psi(x)) \quad (3.9)$$

En remplaçant dans l'expression de  $p(x; E)$  on obtient

$$p(x, E) = -i\hbar \frac{\partial(\ln \Psi(x))}{\partial x} \iff p(x, E) = -i\hbar \frac{\Psi'(x)}{\Psi(x)} \quad (3.10)$$

A partir de cette relation, on remarque que les nœuds de la fonction d'onde  $\Psi(x)$  représentent des singularités pour la fonction moment quantique  $p(x)$ . A ce niveau, on tient à préciser qu'il existe deux types de pôles pour  $p(x)$ . Les pôles mobiles et les pôles fixes : les pôles mobiles sont les nœuds de  $\Psi(x)$  et les pôles fixes constituent les singularités de  $V(x)$ .

On peut démontrer que chaque pôle possède un résidu de  $-i\hbar$ . Cela se fait comme suit

Supposons que  $\Psi(x)$  s'annule pour  $x = x_0$ , donc on peut écrire [8]

$$\Psi(x) = (x - x_0) \Phi(x) \quad (3.11)$$

En remplaçant (3.11) dans l'expression (3.10), nous avons d'une part

$$p(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{(x - x_0) \Phi(x)} [\Phi(x) - (x - x_0) \Phi'(x)] \quad (3.12)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \left[ \frac{1}{(x - x_0)} - \frac{(x - x_0) \Phi'(x)}{(x - x_0) \Phi(x)} \right]$$

D'une autre part, on développe  $p(x)$  en série de Laurent au voisinage de  $x_0$  [8]

$$p(x) = \sum_{k=1}^m \lambda_k (x - x_0)^{-k} + \sum_{k=0}^{\infty} \gamma_k (x - x_0)^k \quad (3.13)$$

et en identifiant terme à terme entre (3.12) et (3.13), on obtient que  $m = 1$  et ainsi

$$\lambda_1 = -i\hbar \quad (3.14)$$

On vient de démontrer que les pôles mobiles sont des pôles simples avec  $-i\hbar$  comme résidus. Ce résultat nous sera utile pour l'obtention de la condition de quantification exacte.

## 3.2 La variable action quantique

La variable action classique a joué un rôle central dans la théorie classique de Hamilton-Jacobi. Par analogie, Padgett et Leacock ont introduit la variable action quantique qu'ils ont définie par [10]

$$J = J(E) \equiv \frac{1}{2\pi} \oint_c p(x, E) dx \quad (3.15)$$

où  $c$  est un contour fermé dans le plan complexe, dans le sens antihoraire, qui renferme les pôles mobiles de  $p(x, E)$  et l'axe réel qui relie les deux points tournants classiques. On obtient ces derniers en résolvant l'équation  $p_c(x, E) = 0$ , i.e,  $E - V(x) = 0$ .

En utilisant le théorème des résidus pour  $n$  pôles la relation (3.15) devient [8]

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{2\pi} \oint_c dx p(x, E) \\ &= i \sum (\text{résidus}) \\ &= in(-i\hbar) \\ J &= n\hbar \end{aligned} \quad (3.16)$$

La dernière relation constitue une condition de quantification exacte. Pour la rendre utilisable, il faut trouver une méthode pour calculer  $J$ . On démontre que ceci est possible en déformant le contour  $c$ , via un changement de variable approprié, pour contenir les pôles fixes de  $p(x, E)$ .

### 3.3 Exemple d'illustration : Oscillateur harmonique à 1D

On prend l'oscillateur harmonique à 1D comme exemple afin d'illustrer la méthode de Padgett et Leacock. Le potentiel  $V(x)$  de ce dernier est donné par [12]

$$V(x) = \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 \quad (3.17)$$

En remplaçant ce potentiel dans l'équation (3.6), celle-ci devient

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + p^2(x, E) = 2\mu \left[ E - \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 \right] = p_c^2(x, E) \quad (3.18)$$

on obtient les points tournants classiques en résolvant l'équation  $p_c(x, E) = 0$ , cherchons ces points

$$p_c(x, E) = 0 \iff E - \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 = 0 \quad (3.19)$$

Cette équation possède deux solutions  $x_1$  et  $x_2$  tel que

$$x_1 = -x_2 = \sqrt{\frac{2E}{\mu\omega^2}} \quad (3.20)$$

la condition de quantification est donnée par

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint_c dx p(x, E) = n\hbar \quad (3.21)$$

où  $c$  est le contour antihoraire qui contient les pôles mobiles de  $p(x, E)$  situés entre  $x_1$  et  $x_2$ .

On constate que  $p(x, E)$  contient un seul pôle fixe ce dernier se situe en  $x \rightarrow \infty$ . Afin de calculer  $J$ , on déforme le contour  $c$  pour renfermer ce pôle situé à l'infini. Pour cela, on effectue le changement de variable  $x = \frac{1}{s}$ . Ainsi, l'intégrale donnée par (3.21) devient

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint_{c_s} \frac{ds}{s^2} p(s, E) \quad (3.22)$$

où  $c_s$  est un contour antihoraire obtenu à partir de la déformation de  $c$ . L'équation de Hamilton-Jacobi quantique en fonction de la nouvelle variable  $s$  prend la forme

$$i\hbar \frac{\partial p(s, E)}{\partial s} + \frac{p(s, E)^2}{s^2} = \frac{2\mu E}{s^2} - \frac{\mu^2 \omega^2}{s^4} \quad (3.23)$$

Le developpement de la fonction moment quantique  $p(s, E)$  en série de Laurent au voisinage de ( $s = 0$ ) donne

$$p(s) = \sum_{k=1}^m b_k s^{-k} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n \quad (3.24)$$

en substituant les expressions (3.24) et (3.23) et en comparant les coefficients, on obtient

$$b_1^2 = -\mu^2 \omega^2 \iff b_1 = \pm i\mu\omega$$

$$2a_0 b_1 = 0$$

$$-i\hbar b_1 + 2a_1 b_1 + a_0^2 = 2\mu E$$

$b_1$  peut prendre deux valeurs  $\pm i\mu\omega$ , en utilisant la condition au limite (cas où  $\hbar \rightarrow 0$ ), on déduit que le signe de  $b_1$  doit être positif. A partir de cela on écrit

$$b_1 = i\mu\omega$$

pour les autres coefficients, on obtient

$$a_0 = 0$$

$$a_1 = \frac{2E - \hbar\omega}{2i\omega}$$

On constate que le seul coefficient qui contribue dans l'expression de  $J$  donnée par (3.22) est  $a_1$ . Donc, on peut écrire

$$J = ia_1 = \frac{1}{2\omega} (2E - \hbar\omega) \quad (3.25)$$

or

$$J = n\hbar$$

finalemt, on obtient [12]

$$\frac{1}{2\omega} (2E - \hbar\omega) = n\hbar \iff E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.26)$$

La relation (3.26) représente le spectre d'énergie exacte de l'oscillateur harmonique à 1D.

# Chapitre 4

## Application à quelques potentiels à une dimension

Dans ce chapitre, nous allons appliquer le formalisme de Hamilton-Jacobie quatique sur quelques potentiels unidimensionnels.

### 4.1 Oscillateur barrière

Le potentiel de l'oscillateur barrière est donné par [8]

$$V(x) = \frac{a^2}{x^2} + x^2 \quad (4.1)$$

où  $a$  est une constante.

On considère la situation où  $x$  ne prend que des valeurs positives.

Après remplacement de (4.1) dans (3.8), on obtient

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x)}{\partial x} + p^2(x) = 2\mu \left( E - \frac{a^2}{x^2} - x^2 \right) = p_c^2(x) \quad (4.2)$$

on pose  $2\mu = 1$ , l'équation (4.2) devient

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x)}{\partial x} + p^2(x) = E - \frac{a^2}{x^2} - x^2 = p_c^2(x) \quad (4.3)$$

les points tournants classiques sont obtenus en résolvant l'équation  $p_c(x) = 0$ , ainsi on peut écrire

$$E - \frac{a^2}{x^2} - x^2 = 0 \quad (4.4)$$

l'équation (4.4) possède quatres solutions  $x_1, x_2, x_3, x_4$  qui sont données par

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{2}\sqrt{2}\sqrt{E - \sqrt{E^2 - 4a^2}} \\ x_2 &= \frac{1}{2}\sqrt{2}\sqrt{E + \sqrt{E^2 - 4a^2}} \\ x_3 &= -\frac{1}{2}\sqrt{2}\sqrt{E - \sqrt{E^2 - 4a^2}} \\ x_4 &= -\frac{1}{2}\sqrt{2}\sqrt{E + \sqrt{E^2 - 4a^2}} \end{aligned} \quad (4.5)$$

où

$x_1$  et  $x_3$  sont symétriques par rapport a 0.

$x_2$  et  $x_4$  sont symétriques par rapport a 0.

Comme on à dit au départ que  $x$  prend que les valeurs positives, donc  $x_3$  et  $x_4$  sont non physique. Ainsi le système possède 2 points tournants classiques  $x_1$  et  $x_2$ .

La condition de quantification est donnée par

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint_c dx p(x, E) = n\hbar$$

où  $c$  est le contour antihoraire qui contient les pôles mobiles de  $p(x, E)$  situés entre  $x_1$  et  $x_2$ .

Pour evaluer  $J$ , le contour  $c$  est déformé pour renfermer les pôles  $x = 0$  et  $x = \infty$ , ainsi que les pôles situés sur l'axe des  $x$  négatives situés entre les points tournants non physiques  $x_3$  et  $x_4$ .

Ainsi, on écrit

$$J = J_0 + J_\infty + J_- \quad (4.6)$$

où  $J_-$  est la contribution des pôles situés entre  $x_3$  et  $x_4$  à  $J$ . Puisque le potentiel  $V(x)$  donné par (4.1) est symétrique par rapport à  $x = 0$ , On peut associer à chaque pôle mobile de  $p$  entre  $x_1$  et  $x_2$  son symétrique situé entre  $x_3$  et  $x_4$  avec un résidu de  $-i\hbar$ ; en d'autres termes,  $p$  est symétrique par rapport à  $x = 0$  pour le nombre et pour la position des poles mobiles avec un résidu de  $-i\hbar$ . Du fait que le contour renfermant les pôles mobiles sur l'axe des  $x$  négatifs est horaire, on a

$$J = -J_- \quad (4.7)$$

conséquent, on écrit

$$J = \frac{J_\infty + J_0}{2} \quad (4.8)$$

Commençons par le calcul de  $J_0$ .

On développe  $p(x)$  en série de Laurent au voisinage de point ( $x = 0$ ), on obtient

$$p(x) = \frac{b_1}{x} + a_0 \Leftrightarrow p^2(x) = \frac{b_1^2}{x^2} + 2\frac{a_0 b_1}{x} + a_0^2 \quad (4.9)$$

ainsi, la dérivée de  $p(x)$  par rapport a  $x$  sera donnée

$$\frac{\partial p(x)}{\partial x} = -\frac{b_1}{x^2} \quad (4.10)$$

Nous notons que le coefficient pertinent est  $b_1$ .

En remplaçant (4.10) et (4.9) dans (4.3), on obtient

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{b_1}{x^2} + \frac{b_1^2}{x^2} + 2\frac{a_0 b_1}{x} + a_0^2 = E - \frac{a^2}{x^2} - x^2 \quad (4.11)$$

par comparaison des termes en  $x^{-2}$ , on écrit

$$-\frac{\hbar}{i} b_1 + b_1^2 = -a^2 \Leftrightarrow b_1 = -\frac{1}{2}i\hbar \pm \frac{1}{2}\sqrt{-4a^2 - \hbar^2} \quad (4.12)$$

En utilisant la condition au limite, on prend

$$b_1 = -\frac{1}{2}i\hbar + \frac{1}{2}\sqrt{-4a^2 - \hbar^2} \quad (4.13)$$

Ainsi, en remplaçant (4.13) dans (3.15) et en utilisant le théorème des résidus, on obtient

$$J_0 = -\frac{1}{2\pi}i2\pi b_1 \Leftrightarrow J_0 = -ib_1 \quad (4.14)$$

le signe  $(-)$  est dû au sens horaire du contour autour de  $x = 0$ .

En remplaçant (4.13) dans (4.14), on obtient

$$\begin{aligned} J_0 &= -i \left( -\frac{1}{2}i\hbar + \frac{1}{2}\sqrt{-4a^2 - \hbar^2} \right) \\ &= -\frac{1}{2}\hbar - \sqrt{a^2 + \frac{\hbar^2}{4}} \end{aligned} \quad (4.15)$$

pour calculer  $J_\infty$ , on doit déformer le contour  $c$  afin de renfermer le pôle  $x = \infty$ . Pour cela on effectue le changement de variable  $x = \frac{1}{s}$ . Ainsi l'équation (4.3) devient

$$\frac{-\hbar}{i} \frac{\partial p(s)}{\partial s} + \frac{p^2(s)}{s^2} = \frac{E}{s^2} - a^2 - \frac{1}{s^4} \quad (4.16)$$

et  $J_\infty$  sera donnée par l'intégrale

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint_{c_s} \frac{ds}{s^2} p(s, E) \quad (4.17)$$

où  $c_s$  est un contour fermé direct.

En développant  $p(s)$  en série de Laurent au voisinage du point  $(s = 0)$ , on obtient

$$p(s) = a_0 + a_1 s + \frac{b_1}{s} \Leftrightarrow p^2(s) = a_0^2 + a_1^2 s^2 + \frac{b_1^2}{s^2} + 2a_0 a_1 s + 2a_0 \frac{b_1}{s} + 2a_1 b_1 \quad (4.18)$$

ainsi

$$\frac{\partial p(s)}{\partial s} = a_1 - \frac{b_1}{s^2} \quad (4.19)$$

A partir de la relation (4.17), nous constatons que le coefficient pertinent est  $a_1$ . En remplaçant (4.18) et (4.19) dans (4.16), on aura

$$\frac{\hbar}{i} a_1 + \frac{\hbar b_1}{i s^2} + \frac{a_0^2}{s^2} + a_1^2 + \frac{b_1^2}{s^4} + \frac{2a_0 a_1}{s} + 2a_0 \frac{b_1}{s^3} + \frac{2a_1 b_1}{s^2} = \frac{E}{s^2} - a^2 - \frac{1}{s^4} \quad (4.20)$$

Par comparaison les termes de mêmes puissances en  $s$ , on obtient

$$b_1^2 = -1 \Leftrightarrow b_1 = i \quad (4.21)$$

$$\frac{\hbar}{i}b_1 + a_0^2 + 2a_1b_1 = E \quad (4.22)$$

En utilisant (4.21) et (4.22), on obtient

$$\hbar + 2ia_1 = E \Leftrightarrow a_1 = -\frac{1}{2}iE + \frac{1}{2}i\hbar \quad (4.23)$$

En substituant (4.18) et (4.17) et en utilisant le théorème des residus, on obtient

$$J_\infty = \frac{1}{2\pi}i2\pi a_1 \Leftrightarrow J_\infty = ia_1 \quad (4.24)$$

En remplaçant (4.23) dans (4.24), on aura

$$J_\infty = \frac{1}{2}(E - \hbar) \quad (4.25)$$

Maintenant on remplace (4.15) et (4.25) dans (4.8) et on obtient

$$J = \frac{1}{2} \left( -\frac{1}{2}\hbar - \sqrt{a^2 + \frac{\hbar^2}{4}} + \frac{1}{2}(E - \hbar) \right) \Leftrightarrow J = \frac{1}{2} \left( -\hbar - \sqrt{a^2 + \frac{\hbar^2}{4}} + \frac{1}{2}E \right) \quad (4.26)$$

En utilisant la condition de quantification ( $J = n\hbar$ ) on écrit

$$\frac{1}{2} \left( -\hbar - \sqrt{a^2 + \frac{\hbar^2}{4}} + \frac{1}{2}E \right) = n\hbar \quad (4.27)$$

en simplifiant la relation (4.27), on obtient [8]

$$E_n = 2\hbar(2n + 1) + 2\sqrt{a^2 + \frac{1}{4}\hbar^2} \quad (4.28)$$

la dernière relation représente le spectre d'énergie de l'oscillateur barrière.

## 4.2 Barrière coulombienne

Le potentiel d'une barrière coulombienne est donné par la relation suivante [9]

$$V(x) = -\frac{g}{x} + \frac{a^2}{x^2} \quad (4.29)$$

où  $g$  et  $a$  sont des constantes.

En remplaçant (4.29) dans (3.8), nous avons

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x)}{\partial x} + p^2(x) = 2\mu \left( E + \frac{g}{x} - \frac{a^2}{x^2} \right) = p_c^2(x) \quad (4.30)$$

on pose  $2\mu = 1$ , l'équation (4.30) devient

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x)}{\partial x} + p^2(x) = E + \frac{g}{x} - \frac{a^2}{x^2} = p_c^2(x) \quad (4.31)$$

On obtient les points tournants classiques en résolvant l'équation  $p_c^2(x) = 0$ , On écrit alors

$$E + \frac{g}{x} - \frac{a^2}{x^2} = 0 \quad (4.32)$$

L'équation (4.32) possède deux solutions  $(x_1, x_2)$  qui ont les formes suivantes

$$\begin{aligned} x_1 &= -\frac{1}{2E} \left( g - \sqrt{4a^2E + g^2} \right) \\ x_2 &= -\frac{1}{2E} \left( g + \sqrt{4a^2E + g^2} \right) \end{aligned} \quad (4.33)$$

le système contient deux points tournants classique.

La condition de quantification est donnée par (3.15)

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint_c dx p(x, E) = n\hbar$$

où  $c$  est le contour antihoraire qui contient les pôles mobiles de  $p(x, E)$  situés entre  $x_1$  et  $x_2$ .

On constate que  $p(x, E)$  possède deux pôles fixes le premier se situe en  $x = 0$  et le deuxième en  $x \rightarrow \infty$ . Ainsi, l'intégrale (3.15) peut être évaluée en déformant le contour  $c$  pour renfermer les pôles fixes de  $p(x)$ .

on écrit

$$J = J_\infty + J_0 \quad (4.34)$$

où  $J_\infty$  et  $J_0$  sont les contributions à  $J$  au niveau des pôles  $x \rightarrow \infty$  et  $x = 0$  respectivement.

Calculons  $J_0$ ; on développe  $p(x)$  en série de Laurent au voisinage du point ( $x = 0$ ), on obtient

$$p(x) = a_0 + b_1 x^{-1} \Leftrightarrow p(x)^2 = a_0^2 + 2a_0 b_1 x^{-1} + b_1^2 x^{-2} \quad (4.35)$$

ainsi, la dérivée de  $p(x)$  sera donnée par

$$\frac{\partial p(x)}{\partial x} = -b_1 x^{-2} \quad (4.36)$$

nous notons que le coefficient pertinent est  $a_1$ .

En remplaçant (4.35) et (4.36) dans (4.31), on aura

$$\frac{-\hbar b_1}{i x^2} + \frac{b_1^2}{x^2} + 2\frac{b_1}{x} a_0 + a_0^2 = \left( E + \frac{g}{x} - \frac{a^2}{x^2} \right) \quad (4.37)$$

par comparaison des termes en  $x^{-2}$ , on obtient

$$\frac{-\hbar}{i} b_1 + b_1^2 = -a^2 \Leftrightarrow b_1 = -\frac{1}{2} i \hbar \pm \frac{i}{2} \sqrt{4a^2 + \hbar^2} \quad (4.38)$$

en utilisant la condition au limite, on choisit

$$b_1 = -\frac{1}{2} i \hbar + \frac{i}{2} \sqrt{4a^2 + \hbar^2} \quad (4.39)$$

En remplaçant (4.35) dans (3.15) et en utilisant le théorème des résidus, on obtient

$$J_0 = -\frac{1}{2\pi} i 2\pi b_1 \Leftrightarrow J_0 = -i b_1 \quad (4.40)$$

en substituant les expressions (4.39) et (4.40), on aura

$$J_0 = \frac{-1}{2}\hbar - \sqrt{a^2 + \frac{\hbar^2}{4}} \quad (4.41)$$

Pour trouver  $J_\infty$ , on doit déformer le contour  $c$  afin de renfermer le pôle  $x \rightarrow \infty$ , pour cela on effectue le changement de variable  $x = \frac{1}{s}$ . Ainsi, l'équation (4.31) devient

$$\frac{-\hbar}{i}s^2 \frac{\partial p(s)}{\partial s} + p^2(s) = (E + gs - a^2s^2) \Leftrightarrow \frac{-\hbar}{i} \frac{\partial p(s)}{\partial s} + \frac{p^2(s)}{s^2} = \left( \frac{E}{s^2} + \frac{g}{s} - a^2 \right) \quad (4.42)$$

Par conséquent,  $J_\infty$  sera donnée par l'intégrale suivante

$$J_\infty = \frac{1}{2\pi} \oint_{c_s} \frac{ds}{s^2} p(s, E) \quad (4.43)$$

où  $c_s$  est un contour fermé direct obtenu à partir de la déformation de  $c$ .

on développe  $p(s)$  en série de Laurent au voisinage du point  $s = 0$ , on obtient

$$p(s) = a_0 + a_1s \Leftrightarrow p^2(s) = a_0^2 + 2a_0a_1s + a_1^2s^2 \quad (4.44)$$

ainsi

$$\frac{\partial p(s)}{\partial s} = a_1 \quad (4.45)$$

Par rapport à l'intégrale (4.43), nous remarquons que le coefficient pertinent est  $a_1$ .

En remplaçant (4.44) et (4.45) dans (4.42), on aura

$$\frac{-\hbar}{i}a_1 + \frac{a_0^2}{s^2} + \frac{2a_0a_1}{s} + a_1^2 = \left( \frac{E}{s^2} + \frac{g}{s} - a^2 \right) \quad (4.46)$$

et en identifiant l'équation (4.46) terme à terme, on obtient

$$a_0^2 = E \Leftrightarrow a_0 = \pm\sqrt{E} \quad (4.47)$$

$$2a_0a_1 = g \quad (4.48)$$

en utilisant la condition au limite, on choisit

$$a_0 = \sqrt{E} \quad (4.49)$$

en remplaçant (4.49) dans (4.48), on obtient

$$2\sqrt{E}a_1 = g \iff a_1 = \frac{1}{2} \frac{g}{\sqrt{E}} \quad (4.50)$$

en remplaçant (4.44) dans (4.43) et en utilisant le théorème des résidus on obtient

$$J_\infty = \frac{1}{2\pi} i 2\pi a_1 \iff J_\infty = i a_1 \quad (4.51)$$

en substituant les expressions (4.50) et (4.51), on aura

$$J_\infty = \frac{1}{2} \frac{g}{\sqrt{-E}} \quad (4.52)$$

En utilisant (4.41) et (4.52) dans (4.34)

$$J = \frac{-1}{2} \hbar - \sqrt{a^2 + \frac{\hbar^2}{4}} + \frac{1}{2} \frac{g}{\sqrt{-E}} \quad (4.53)$$

En appliquant la condition de quantification exacte ( $J = n\hbar$ ), on obtient [9]

$$E_n = -\frac{1}{4} \frac{g^2}{\left(\sqrt{\frac{1}{4}\hbar^2 + a^2} + \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\right)^2} \quad (4.54)$$

la dernière relation constitue le spectre d'énergie de la barrière coulombienne.

### 4.3 Oscillateur harmonique sur une demi-ligne

Le potentiel de l'oscillateur harmonique à demi-ligne à 1D est donné par la relation (3.17)

[10]

$$V(x) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2$$

on considère la cas où  $x$  prend que des valeurs positives. Ainsi, l'équation de Hamilton-Jacobi quantique est la même que celle de l'oscillateur harmonique (3.18)

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + p^2(x, E) = 2\mu \left[ E - \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \right] = p_c^2(x, E)$$

en resolvant l'équation  $p_c(x, E)^2 = 0$ , on obtient les points tournants classique. Ainsi on peut écrire

$$E - \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 = 0 \tag{4.55}$$

cette équation possède deux solutions  $(x_1, x_2)$  tel que

$$x_1 = -\sqrt{\frac{2E}{\mu\omega^2}}$$

$$x_2 = \sqrt{\frac{2E}{\mu\omega^2}} \tag{4.56}$$

on remarque que  $(x_1 < 0)$ , donc cette valeur est non physique et cela nous oblige à considérer le point  $x = 0$  comme deuxième point tournant classique.

La condition de quantification est donnée par la relation (3.15)

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint_c dx p(x, E) = n\hbar$$

où  $c$  est le contour antihoraire qui contient les pôles mobiles de  $p(x, E)$  situé entre 0 et  $x_2$ .

Cette situation est similaire à celle du potentiel où on avait quatre points tournants symétrique par rapport à  $x = 0$ . Ainsi, elle sera traitée de la même façon, Par conséquent, la variable action quantique sera donnée par

$$J = \frac{J_\infty + J_0}{2} \tag{4.57}$$

Pour le calcul de  $J_0$ , on developpe  $p(x)$  en série de Laurent au voisinage de  $x = 0$ , on obtient

$$p(x) = \frac{b_1}{x} + a_0 \Leftrightarrow p(x)^2 = \frac{b_1^2}{x^2} + 2\frac{a_0 b_1}{x} + a_0^2 \tag{4.58}$$

ainsi, la dérivée de  $p(x)$  est donnée par

$$\frac{\partial p(x)}{\partial x} = -\frac{b_1}{x^2} \quad (4.59)$$

Dans le présent problème, le coefficient pertinent est  $b_1$ .

En remplaçant (4.58) et (4.59) dans (3.18), on aura

$$\frac{-\hbar b_1}{i x^2} + \frac{b_1^2}{x^2} + 2\frac{a_0 b_1}{x} + a_0^2 = 2\mu \left[ E - \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \right] \quad (4.60)$$

par comparaison des termes en  $x^{-2}$ , on obtient

$$\frac{-\hbar}{i} b_1 + b_1^2 = 0 \quad (4.61)$$

on remarque que l'équation (4.61) possède deux solutions

$$b_1 = 0 \text{ ou } b_1 = -i\hbar$$

en utilisant la condition au limite, on choisit

$$b_1 = -i\hbar \quad (4.62)$$

en remplaçant (4.62) dans (3.15) et en utilisant le théorème des résidus, on obtient

$$J_0 = -\frac{1}{2\pi} i 2\pi b_1 \Leftrightarrow J_0 = -i b_1 \quad (4.63)$$

en remplaçant (4.62) dans (4.63), on aura

$$J_0 = -i b_1 \Leftrightarrow J_0 = -\hbar \quad (4.64)$$

Pour le calcul de  $J_\infty$ , on effectue le changement de variable  $x = \frac{1}{s}$ . Conséquemment, l'équation (3.18) devient

$$i\hbar \frac{\partial p(s, E)}{\partial s} + \frac{p(s, E)^2}{s^2} = \frac{2\mu E}{s^2} - \frac{\mu^2 \omega^2}{s^4} \quad (4.65)$$

et  $J_\infty$  sera donnée par l'intégrale

$$J_\infty = \frac{1}{2\pi} \oint_{c_s} \frac{ds}{s^2} p(s, E) \quad (4.66)$$

où  $c_s$  est un contour fermé direct obtenu à partir de la déformation de  $c$ .

On développe  $p(x)$  en série de Laurent au voisinage du point  $s = 0$ , on obtient

$$p(s) = a_0 + a_1 s + \frac{b_1}{s} \iff p(s)^2 = a_0^2 + a_1^2 s^2 + \frac{b_1^2}{s^2} + 2a_0 a_1 s + 2a_0 \frac{b_1}{s} + 2a_1 b_1 \quad (4.67)$$

ainsi, la dérivée de  $p(x)$  s'écrit

$$\frac{\partial p(s)}{\partial s} = a_1 - \frac{b_1}{s^2} \quad (4.68)$$

nous notons que le coefficient pertinent est  $a_1$ .

En remplaçant (4.68) et (4.67) dans (4.65), on aura

$$\frac{\hbar}{i} a_1 + \frac{\hbar b_1}{i s^2} + \frac{a_0^2}{s^2} + a_1^2 + \frac{b_1^2}{s^4} + \frac{2a_0 a_1}{s} + 2a_0 \frac{b_1}{s^3} + \frac{2a_1 b_1}{s^2} = 2\mu \left[ \frac{E}{s^2} - \frac{1}{2} \frac{\mu \omega^2}{s^4} \right] \quad (4.69)$$

par identification, on obtient

$$b_1^2 = -\mu^2 \omega^2 \iff b_1 = \pm i \mu \omega$$

$$2a_0 b_1 = 0 \iff a_0 = 0 \quad (4.70)$$

$$-i \hbar b_1 + 2a_1 b_1 + a_0^2 = 2\mu E \quad (4.71)$$

$b_1$  peut prendre deux valeurs  $\pm i \mu \omega$ , en utilisant la condition au limite ( cas où  $\hbar \rightarrow 0$  ), on déduit que le signe de  $b_1$  doit être positif , à partir de cela

$$b_1 = i \mu \omega \quad (4.72)$$

en remplaçant (4.72) et (4.70) dans (4.71), on obtient

$$a_1 = \frac{E - \hbar\omega}{2i\omega} \quad (4.73)$$

et en substituant les expressions (4.67) et (3.15) et en utilisant le théorème des résidus, on obtient

$$J_\infty = \frac{1}{2\pi} i 2\pi a_1 \Leftrightarrow J_\infty = i a_1 \quad (4.74)$$

ainsi, en remplaçant (4.73) dans (4.74), on obtient

$$J_\infty = \frac{1}{2\omega} (2E - \hbar\omega) \quad (4.75)$$

en remplaçant (4.64) et (4.75) dans (4.57)

$$J = \frac{1}{2\omega} (2E - \hbar\omega) - \hbar \quad (4.76)$$

en utilisant la condition de quantification exacte, on écrit

$$\frac{1}{2\omega} (2E - \hbar\omega) + \hbar = n\hbar \quad (4.77)$$

en simplifiant (4.77), on obtient [10]

$$E_n = \omega\hbar \left( n + \frac{3}{2} \right) \quad (4.78)$$

Finalement on retrouve le spectre d'énergie exacte de l'oscillateur harmonique sur une demi-ligne.

## 4.4 Potentiel d'Eckart

Le potentiel d'Eckart est donné sous la forme suivante [10]

$$V(x) = \omega^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \frac{\partial\omega(x)}{\partial x} \quad (4.79)$$

avec

$$\omega(x) = -A \coth(ax) + \frac{B}{A} \quad (4.80)$$

où  $A, B$  et  $a$  sont des constantes et  $x$  est positif.

En remplaçant (4.80) dans (4.79), on obtient

$$V(x) = A^2 + \frac{B^2}{A^2} + A \left( A - \frac{a\hbar}{\sqrt{2\mu}} \right) \operatorname{sech}^2(ax) - 2B \coth(ax) \quad (4.81)$$

en utilisant la relation (4.81), l'équation (3.6) prend la forme

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + p^2(x, E) = 2\mu \left[ E - A^2 - \frac{B^2}{A^2} - A \left( A - \frac{a\hbar}{\sqrt{2\mu}} \right) \operatorname{sech}^2(ax) + 2B \coth(ax) \right] \quad (4.82)$$

Pour simplifier l'analyse, on effectue le changement de variable  $y = e^{ax}$ . Les relations (4.80) et (4.81) deviennent

$$\omega(x) = -A \frac{y^2 + 1}{y^2 - 1} + \frac{B}{A} \quad (4.83)$$

$$V(y) = A^2 + \frac{A^2}{B^2} + \frac{4A \left( A - \frac{a\hbar}{\sqrt{2\mu}} \right) y^2}{(y^2 - 1)^2} - \frac{2B(y^2 + 1)}{(y^2 - 1)} \quad (4.84)$$

En remplaçant (4.84) dans (4.82), on obtient

$$\frac{a\hbar}{i} y \frac{\partial p(y, E)}{\partial y} + p^2(y, E) = 2\mu \left[ E - A^2 - \frac{A^2}{B^2} - \frac{4A \left( A - \frac{a\hbar}{\sqrt{2\mu}} \right) y^2}{(y^2 - 1)^2} + \frac{2B(y^2 + 1)}{(y^2 - 1)} \right] \quad (4.85)$$

L'équation  $p_c^2(y, E) = 0$  possède quatre solutions dont deux sont positives et deux négatives (elles sont symétriques par rapport à 0), ainsi le système contient deux points tournants classiques (les solutions positives).

La variable action quantique devient

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint_{c_y} \frac{dy}{y} p(y, E) \quad (4.86)$$

à partir de (4.85) et (4.86) on constate que  $p(y, E)$  possède quatre pôles fixes le premier se situe en  $y = 0$ , le deuxième en  $y = 1$  et le troisième en  $y = -1$  et le pole situé à l'infini. Cette situation est similaire à celle du potentiel où on avait quatre points tournants. Ainsi, elle sera traitée de façon similaire. Dans ce cas, la variable action quantique s'écrira

$$J = \frac{J_\infty - J_0 - 2J_{(1)}}{2} \quad (4.87)$$

Pour calculer  $J_0$ , on developpe  $p(y)$  en série de Laurent au voisinage du point  $y = 0$ , on aura

$$p(y) = a_0 + a_1y + \frac{b_1}{y} \iff p(y)^2 = a_0^2 + a_1^2y^2 + \frac{b_1^2}{y^2} + 2a_0a_1y + 2a_0\frac{b_1}{y} + 2a_1b_1 \quad (4.88)$$

ainsi, la derivée de  $p(y)$  s'écrit

$$\frac{\partial p(y)}{\partial y} = a_1 - \frac{b_1}{y^2} \quad (4.89)$$

nous notons que le seul coefficient pertinent est  $a_0$ .

On remplace (4.88) et (4.89) dans (4.85), on obtient

$$\frac{a\hbar}{i}y \left( a_1 - \frac{b_1}{y^2} \right) + a_0^2 + a_1^2y^2 + \frac{b_1^2}{y^2} + 2a_0a_1y + 2a_0\frac{b_1}{y} + 2a_1b_1 = 2\mu[E - A^2 - \frac{A^2}{B^2} - \frac{4A \left( A - \frac{a\hbar}{\sqrt{2\mu}} \right) y^2}{(y^2 - 1)^2} + \frac{2B(y^2 + 1)}{(y^2 - 1)}] \quad (4.90)$$

après comparaison des termes en  $\frac{1}{y}$ , on obtient

$$a_0^2 = 2\mu(E - A^2 - \frac{A^2}{B^2} + 2B) \quad (4.91)$$

en remplaçant (4.88) dans (4.86) et en utilisant le théorème des residus on aura

$$J_0 = -\frac{1}{2\pi}i2\pi a_0 \iff J_0 = -ia_0 \quad (4.92)$$

en substituant les expressions (4.43) et (4.44), on obtient

$$J_0 = -i\sqrt{2\mu(E - A^2 - \frac{A^2}{B^2} - 2B)} \quad (4.93)$$

Maintenant calculons  $J_1$ ,

on developpe  $p(y)$  en série de Laurent au point  $y = 1$ , on obtient

$$p(y) = a_0 + a_1(y-1) + \frac{b_1}{(y-1)} \iff p(y)^2 = a_0^2 + a_1^2(y-1)^2 + \frac{b_1^2}{(y-1)^2} + 2a_0a_1(y-1) + 2a_0\frac{b_1}{(y-1)} + 2a_1b_1 \quad (4.94)$$

ainsi, la dérivée de  $p(y)$  s'écrit

$$\frac{\partial p(y)}{\partial y} = a_1 - \frac{b_1}{(y-1)^2} \quad (4.95)$$

nous constatons que le coefficient pertinent est  $b_1$ .

En remplaçant (4.94) et (4.95) dans (4.85) et en identifiant les coefficient, on obtient

$$b_1 = i\sqrt{2\mu}A \quad (4.96)$$

En remplaçant (4.94) dans (4.86) et en utilisant le théorème des residus on aura

$$J_1 = -\frac{1}{2\pi}i2\pi b_1 \iff J_1 = -ib_1 \quad (4.97)$$

En remplaçant (4.96) dans (4.97), on obtient

$$J_1 = \sqrt{2\mu}A \quad (4.98)$$

Maintenant calculons  $J_\infty$ , faisant le changement de variable  $y = \frac{1}{s}$ . En developpant  $p(s)$  en

série de Laurent puis en comparant les coefficients, on obtient

$$J_{\infty} = \sqrt{2\mu\left(E - A^2 - \frac{A^2}{B^2} + 2B\right)} \quad (4.99)$$

En remplaçant (4.92) , (4.98) et (4.99) dans (4.87) , on aura

$$J = \frac{\sqrt{2\mu\left(E - A^2 - \frac{A^2}{B^2} + 2B\right)} + i\sqrt{2\mu\left(E - A^2 - \frac{A^2}{B^2} - 2B\right)} - 2\sqrt{2\mu}A}{2} \quad (4.100)$$

En utilisant la condition de quantification exacte ( $J = n\hbar$ ) , on obtient

$$\sqrt{2\mu\left(E - A^2 - \frac{A^2}{B^2} + 2B\right)} + i\sqrt{2\mu\left(E - A^2 - \frac{A^2}{B^2} - 2B\right)} - 2\sqrt{2\mu}A = 2n\hbar$$

ainsi [10]

$$E_n = A^2 + \frac{B^2}{A^2} - \frac{B^2}{\left(\frac{n\hbar}{\sqrt{2\mu}} + A\right)^2} - \left(\frac{n\hbar}{\sqrt{2\mu}} + A\right)^2 \quad (4.101)$$

finalement, on obtient le spectre d'énergie du potentiel d'Eckart.

# Chapitre 5

## Conclusion

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à la théorie de Hamilton-Jacobi quantique introduite par Padgett et Leacock en 1983. Dans cette approche, il est postulé que l'équation de Hamilton-Jacobi quantique est l'équation fondamentale pour l'étude des systèmes quantiques. On peut démontrer via un changement de variable approprié que l'équation de Hamilton-Jacobi quantique est équivalente à l'équation de Schrödinger.

Le point important dans cette approche est l'introduction de la variable action quantique comme une intégrale, sur un contour fermé dans le plan complexe, de la fonction moment quantique. Le fait que les nœuds de la fonction d'onde correspondent aux singularités de la fonction moment quantique, a conduit Padgett et Leacock à établir une condition de quantification exacte sur la variable action quantique. Cette condition permettra l'obtention des spectres d'énergies de plusieurs systèmes quantiques.

L'aspect important de cette méthode est qu'elle ne nécessite pas la connaissance de la solution complète de l'équation de Hamilton-Jacobi quantique mais seulement l'identification des singularités de la fonction moment quantique, qu'on appelle pôles fixes. Ces pôles correspondent aux singularités du potentiel.

Dans ce mémoire, nous avons appliqué avec succès cette méthode sur quelques potentiels à une dimension. Ceci a mis en évidence l'efficacité de l'application de cette dernière.

Comme perspective, nous pouvons prévoir l'application de cette approche sur des systèmes tridimensionnels non centraux et séparables, ainsi que sur les systèmes relativistes obéissant aux équations de Dirac et de Klein-Gordon.

# Bibliographie

- [1] H. Goldstein, Classical Mechanics (Addison-Wesley, New York, 1980).
- [2] E. J. Saletan and A. H. Cromer, Theoretical Mechanics (John Wiley, New York, 1971).
- [3] D. F. Styer, et. al. Am. J. Phys. (2002).
- [4] G. Plante, solution analytique de l'équation de Schrödinger, université de québec (2005).
- [5] A. Boucif, Introduction à la mécanique analytique (Ellipses Marketing, 2007).
- [6] Marco Roncadelli and L. S. Schulman. Phys Rev. Lett, 99(17), (2007).
- [7] R. A. Leacock and M. J. Padgett, Phys. Rev. Lett. 50, 3 (1983).
- [8] S. Sree ranjani, quantum Hamilton-Jacobi solution for spectra of several one dimensional potentials with special properties, HYDERABAD - 500046, INDIA (2004).
- [9] R. A. Leacock and M. J. Padgett, Phys. Rev. D28, 2491 (1983).
- [10] A. K. Kapoor R. S. Bhalla and P. K. Panigrahi. arXiv, quant-ph/9512018v2, (1996).
- [11] A. K. Kapoor R. S. Bhalla and P. K. Panigrahi Am. J. Phys. Rev. Lett, (1997).
- [12] A. Gharbi et A. Bouda, communication CNPA mostaganem (2012).