



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

Rédigé par

TACHOUAFT Lamine

En vue de l'obtention du diplôme de master en Physique

Spécialité : Physique Théorique

Intitulé

Traitement exact de quelques potentiels non relativistes dans le cadre du formalisme de Hamilton-Jacobi quantique

Soutenu le 30/06/2016 devant le jury composé de :

Mr	BELABBAS Abdelmoumene	<i>Président</i>	MCB	Béjaïa
Mr	BELHADI Zahir	<i>Examineur</i>	MAA	Béjaïa
Mr	GHARBI Abdelhakim	<i>Rapporteur</i>	MCA	Béjaïa

Année Universitaire 2015/2016

Remerciements

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

Je tiens à remercier en particulier Monsieur Abdelhakim Gharbi d'avoir accepté de m'encadrer pour la réalisation ce mémoire, je ne le remercierais pas pour son aide, ses conseils et ses explications prodigués durant cette période.

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

Je tiens également à remercier mes parents, mon frère, et mes sœurs pour leurs soutiens et leurs encouragements tout au long de ces nombreuses années d'études.

Dédicaces

Je dédie ce travail de fin d'études à mes parents, mon frère Farid et mes sœurs qui m'ont soutenus et encouragé tout au long de mon cursus et en particulier durant cette période de rédaction de ce mémoire.

Aussi, je le dédie à mes amis Salim et Berzak, Samra, Soumia et toutes les autres, pour leurs aides et soutiens au cours de cette année de fin d'études.

Enfin, je dédie ce travail, fait avec tant de passion, à tous ceux qui portent intérêt à la physique.

Table des matières

1	Introduction	3
2	Formalisme de Hamilton-Jacobi quantique	5
2.1	Introduction	5
2.2	Théorie de Hamilton-Jacobi quantique	6
2.3	Oscillateur Harmonique à une dimension	8
2.4	Conclusion	11
3	Systèmes simples à une dimension	12
3.1	Introduction	12
3.2	Le potentiel de Rosen-Morse	12
3.3	Le potentiel de Scarf-I (trigonométrique)	16
3.4	L'oscillateur de Morse	18
3.5	Le potentiel de Poschl-Teller	21
3.6	Conclusion	25
4	Application au potentiel coulombien	26
4.1	Introduction	26
4.2	Equation de Hamilton-Jacobi quantique à 3D	26
4.3	La solution radiale	30
4.4	La solution angulaire	35
5	Conclusion	44

La résolution de l'équation de Schrödinger est une tâche de grande importance en mécanique quantique car elle permet l'obtention des spectres d'énergies et des fonctions d'ondes correspondantes pour un système quantique stationnaires. La connaissance des ces spectres est indispensable dans les domaines de la physique atomique, physique nucléaire, chimie théorique...etc. Pour cela, depuis l'avènement de la mécanique quantique, plusieurs méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger ont été développées. On peut citer la méthode de factorisation, la méthode supersymétrique, le formalisme des intégrale de chemins, la méthode de l'espace des impulsions, la méthode de la théorie des groupe, la méthode de Nikiforov et Ouvarov, la méthode des itérations asymptotiques... etc.

Récemment, le formalisme de Hamilton-Jacobi quantique s'est distingué comme une méthode simple et efficace pour le traitement exacte des systèmes quantiques stationnaires. Cette méthode a été proposée premièrement par Padgett et Leacock en 1983 [1, 2], où ils ont déterminé, par le moyen d'une condition de quantification exacte, le spectre d'énergie de quelques systèmes stationnaires. Par la suite, elle a été améliorée par Kapoor et al. [3, 4, 5] pour obtenir, en plus des niveaux d'énergie, les fonctions d'ondes correspondantes. Une extension relativiste a été développée et appliquée par Choi et al. [6, 7] à quelques potentiels centraux dans le contexte de l'équation de Klein-Gordon et l'équation de Dirac. Par ailleurs, cette méthode a été utilisée avec succès pour l'étude des modèles quasi-exactement solvables et pour obtenir les solutions analytiques d'un oscillateur singulier à deux dimensions, de potentiels supersymétriques, des potentiels non hermitiens

type exponentiel, des hamiltoniens à symétrie PT et des problèmes à masse dépendante de la position.

L'objectif de ce mémoire est de présenter le formalisme de Hamilton-Jacobi quantique, notamment, sa version améliorée de Kapoor et al.. Dans le chapitre 2, un exposé général du formalisme de Hamilton-Jacobi quantique, pour les systèmes non-relativistes, sera donné, suivi d'un exemple d'illustration qui est celui de l'oscillateur harmonique. Le chapitre 3 sera consacré à la résolution exacte de quelques potentiels usuels à une dimension par le moyen de cette méthode. Le chapitre 4 sera consacré à l'application de cette technique au potentiel coulombien qui est le modèle théorique pour la description de l'atome d'hydrogène. Finalement, on termine par une conclusion succincte.

Formalisme de Hamilton-Jacobi quantique

Dans le présent chapitre nous allons introduire les concepts de base du formalisme de Hamilton-Jacobi quantique.

2.1 Introduction

En mécanique classique [8], le formalisme de Hamilton Jacobi permet d'obtenir les fréquences propres d'un système périodique sans passer par la résolution des équations de mouvements, et cela en exploitant les variables action angle classiques . Ces dernières sont définies par une transformation canonique. Dans le même esprit, Leacock et Padgett ont présenté, en 1983 [1, 2], une version quantique du formalisme de Hamilton Jacobi où les spectres exactes d'énergies de systèmes quantiques à 1D et à 3D, ont été obtenus. Dans la première version de cette technique, la démarche de Padgett et Leacock présente l'avantage de contourner la résolution de l'équation de Schrödinger. Ceci a été rendu possible par l'adoption d'une condition de quantification exacte sur la variable action quantique. Celle-ci est liée à la fonction moment quantique elle-même solution d'une équation déduite de

l'équation de Hamilton-Jacobi quantique. Les concepts qu'on vient de mentionner vont être définis dans ce qui suit.

2.2 Théorie de Hamilton-Jacobi quantique

Dans la théorie de la variable action quantique, Padgett et Leacock postulent que l'équation de Hamilton Jacobi Quantique (EHJQ) pour un système stationnaire à 1D est de la forme [1, 2]

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2 W(x, E)}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial W(x, E)}{\partial x} \right)^2 = 2\mu [E - V(x)] \quad (2.2.1)$$

où E est l'énergie de la particule, μ sa masse, $W(x, E)$ est la fonction caractéristique quantique (action réduite) et $V(x)$ est le potentiel que subit la particule. Dans la méthode de Padgett et Leacock, l'équation de Hamilton Jacobi quantique représente l'équation fondamentale pour l'étude du système. Elle est reliée à l'équation de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x), \quad (2.2.2)$$

par la transformation [1, 2]

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} W\right) \quad (2.2.3)$$

On définit la fonction moment quantique (FMQ) par

$$p(x, E) = \frac{\partial W(x, E)}{\partial x}, \quad (2.2.4)$$

ainsi l'équation (2.2.1) devient

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + p^2(x, E) = 2\mu [E - V(x)] = p_c^2(x, E) \quad (2.2.5)$$

où p_c est la fonction moment classique. Par conséquent, nous obtenons la condition aux limites suivante sur la fonction moment quantique [1, 2]

$$p(x, E) \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} p_c(x, E) \quad (2.2.6)$$

La condition précédente permettra ultérieurement de déterminer le signe de $p(x, E)$. En utilisant (2.2.3) et (2.2.4), on trouve que

$$p(x, E) = \frac{\hbar \psi'(x)}{i \psi(x)} \quad (2.2.7)$$

A partir de la relation précédente, on déduit que les zéros ou les nœuds de la fonction d'onde $\psi(x)$ sont des singularités pour $p(x, E)$. On démontre que ces singularités sont des pôles simples et que chaque pôle possède un résidu de $-i\hbar$ [1, 2]. Ce résultat sera d'une importance cruciale dans l'élaboration de la condition de quantification.

La variable action quantique est défini par [1, 2]

$$J = (1/2\pi) \oint_c dx p(x, E) \quad (2.2.8)$$

où c est un contour fermé direct (anti-horaire) dans le plan complexe . Il renferme le segment de droite de l'axe des x réels situé entre les deux points tournants classiques solutions de l'équation $p_c(x, E) = \sqrt{2\mu[E - V(x)]} = 0$. End'autres termes, ce contour ne comprend que les noeuds de la fonction d'onde . Ainsi, l'intégrale de contour précédente ne fait, selon le théorème des résidus, que le décompte du nombre de pôles de $p(x, E)$ entre les deux points tournants. On démontre que pour un état lié d'énergie E , la fonction d'onde $\psi(x)$ possède un nombre finie de nœuds. Ces derniers constituent des pôles simples de $p(x, E)$. La position et le nombre de ses pôles dépendent de E . On appelle ce type de singularités pôles mobiles. Du fait que $p(x, E)$, est solution de (2.2.5), elle possède aussi un autre type de singularités qui sont celles du potentiel $V(x)$. Ces dernières ne dépendent pas de E , elles sont dites pôles fixes. Ainsi, Pour un certain niveau d'énergie E , le nombre quantique n est égal au nombre de nœuds de la fonction d'onde, et par conséquent, au nombre de pôles de $p(x, E)$ à l'intérieur du contour définie dans la relation (2.2.8). Sachant que le résidus en chaque pôles mobiles vaut $-i\hbar$, la relation (2.2.8) devient [1, 2]

$$J = (1/2\pi) \oint_c dx p(x, E) = i \sum (\text{résidus}) = in(-i\hbar) \quad (2.2.9)$$

et donc

$$J = n\hbar \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2.10)$$

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 via un changement de variable approprié pour contenir les pôles fixes de $p(x, E)$ [1, 2]. Le formalisme de Hamilton-Jacobi quantique dans la version Padgett et Leacock ne permet que l'obtention du spectre d'énergie. Il ne détermine pas les fonctions propres correspondantes.

Pour palier à cette insuffisance, Kapoor et al. [3, 4, 5] ont complété cette méthode pour obtenir, en plus du spectre d'énergie, les fonctions propres correspondantes. Pour cela, ils ont utilisé, dans leurs version améliorée, un résultat de l'analyse complexe, qui stipule que la fonction moment quantique [3, 4, 5] peut être écrite comme la somme de toutes les parties principales des série de Laurent au voisinage de chaque singularité de la FMQ dans le plan complexe fini, plus une constante qui représente, en vertu du théorème de Liouville, une partie analytique et bornée.

Pour illustrer la technique de Kapoor et al., nous allons étudier l'exemple de l'oscillateur harmonique.

2.3 Oscillateur Harmonique à une dimension

On reprend l'équation (2.2.5) [5]

$$p^2 - i\hbar \frac{\partial p}{\partial x} = 2\mu(E - V(x)) \quad (2.3.1)$$

qui est un cas particulier de l'équation de Riccati suivante

$$A(x)p^2 + B(x)p + C(x) + i\frac{dp}{dx} = 0 \quad (2.3.2)$$

de l'équation (2.3.1) découle l'équation de Schrödinger pour un potentiel quelconque $V(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.3.3)$$

Aussi d'après (2.2.7), la fonction moment quantique est reliée à la fonction d'onde par

$$p = -i\hbar \frac{d}{dx} \ln \psi(x) \quad (2.3.4)$$

cette dernière relation est inversée pour remonter à la fonction d'onde (2.3.4) :

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p dx\right) \quad (2.3.5)$$

Pour un oscillateur harmonique, de potentiel est [5]

$$V(x) = kx^2/2,$$

en utilisant les définitions [5] $\tau = \alpha x$, $\lambda = 2E/\hbar\omega_c$, $\omega_c = \sqrt{k/\mu}$ et $\mu k = \hbar^2\alpha^4$, l'équation de Schrödinger devient,

$$\frac{\partial^2 \tilde{\psi}(\tau)}{\partial \tau^2} + (\lambda - \tau^2) \tilde{\psi}(\tau) = 0 \quad (2.3.6)$$

et l'équation de la FMQ correspondante prend la forme :

$$p^2 - i \frac{dp}{d\tau} = \lambda - \tau^2 \quad (2.3.7)$$

De cette dernière, on peut voir que p tend vers $\pm i\tau$ quand τ tend vers ∞ . Pour avoir le bon comportement de p à l'infini, on utilise la relation entre p et ψ suivante

$$\psi(\tau) = \exp\left(i \int p d\tau\right) \quad (2.3.8)$$

et en imposant à $\psi(x)$ d'être de carré sommable, le comportement correct de p à l'infini correspond à [5]

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} p \approx i\tau \quad (2.3.9)$$

La fonction moment quantique a un nombre fini de singularités dans le plan complexe et un point singulier isolé à l'infini. La connaissance de ces points singuliers permet de retrouver les énergies et les fonctions propres des états liés.

Dans l'approche de Kapoor et al., la fonction moment quantique peut être écrite comme une somme de toutes les parties principales du développement de Laurent autour de chaque singularité dans le plan complexe fini de x , plus un terme constant qui correspond à une partie analytique et bornée [5]. Cette écriture jouera un rôle crucial dans la construction des solutions exactes du problème.

Ainsi, on peut écrire p comme

$$p(\tau) = \sum_{k=1}^n \frac{-i}{\tau - \tau_k} + i\tau + Q(\tau) \quad (2.3.10a)$$

où $-i$ est le résidu de p en chaque pôle mobile τ_k dont le nombre est n , la somme décrit la partie principale du développement de Laurent autour de chaque pôle, $i\tau$ est la limite de p à l'infini et $Q(\tau)$ une fonction analytique et bornée pour un grand τ .

Nous pouvons aussi réécrire p comme [5] :

$$p(\tau) = -i \frac{S'_n}{S_n} + i\tau + C \quad (2.3.11)$$

où S_n est un polynôme de degré n donné par $S_n = \prod_{k=1}^n (\tau - \tau_k)$. Nous allons chercher S_n et C . On remplaçant (2.3.11) dans l'équation (2.3.7), on trouve que :

$$S_n'' - 2\tau S_n' + 2iC S_n' - 2i\tau C S_n - C^2 S_n + (\lambda - 1) S_n = 0 \quad (2.3.12)$$

En égalant dans l'équation précédente les facteurs de τ^{n+1} et de τ^n à zéro, on aboutit à

$$C = 0, \quad \lambda = 2n + 1 \quad (2.3.13)$$

ce qui donn pour la deuxième relation

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad (2.3.14)$$

On vient de retrouver le spectre d'énergie de l'oscillateur harmonique. En injectant les conditions précédentes (2.3.13) dans l'équation (2.3.12), cette dernière prend la forme de l'équation différentielle des polynomes d'Hermite

$$H_n'' - 2\tau H_n' + 2nH_n = 0 \quad (2.3.15)$$

Par conséquent, le polynome S_n est un polynome d'Hermite. Enfin, d'après (2.3.8) les fonctions d'ondes sont données par :

$$\psi(\tau) = \exp\left(i \int p d\tau\right) = \exp\left(-\frac{\tau^2}{2} + \ln(H_n(\tau))\right) \quad (2.3.16)$$

ou encore finalement

$$= A \cdot H_n(\tau) \exp(-\tau^2) \quad (2.3.17)$$

où A est une constante de normalisation. On retrouve bien le résultat connu pour l'oscillateur harmonique. Aussi, on voit bien la simplicité et l'efficacité de cette méthode [5].

2.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les concepts de base pour du formalisme de Hamilton-Jacobi quantique dans sa version de Padgett et Leacock et celle améliorée de Kapoor et al., et afin d'illustrer la méthodologie de travail de cette technique, nous avons construit les solutions exactes de l'oscillateur harmonique.

3 Systèmes simples à une dimension

3.1 Introduction

Comme application du formalisme de Hamilton-Jacobi quantique, on se propose d'étudier les systèmes unidimensionnels suivants

1. Le potentiel de Rosen-Morse.
2. Le potentiel de Scarf-I.
3. L'oscillateur de Morse.
4. Le potentiel de Poschl-Teller.

3.2 Le potentiel de Rosen-Morse

En général, les potentiels étudiés ne sont pas fractionnaires en x . Pour cela nous utilisons un changement de variable $y = f(x)$. Ainsi pour un potentiel quelconque $V(x)$, l'équation (2.3.1) avec ($2\mu = \hbar = 1$) est [9, 10]

$$p^2 - ip' - [E - V(x)] = 0, \quad (3.2.1)$$

après le changement de variable et introduction de K comme $K = ip(x(y))$, elle devient :

$$k^2(y) + F(y) \frac{dk(y)}{dy} + E - \tilde{V}(y) = 0 \quad (3.2.2)$$

où $F(y) = \frac{df(x)}{dx}$ exprimée en fonction de y et $\tilde{V}(y) = V(x(y))$.

On observe que l'équation (3.2.2) n'a pas la forme de (3.2.1) et pour y remédier on introduit ζ par les équations suivantes

$$\begin{cases} K = F(y) \phi(y) \\ \zeta(y) = \phi(y) + \frac{1}{2} \frac{d}{dy} (\ln F(y)) \end{cases} \quad (3.2.3)$$

Et après substitution dans (3.2.2), on aura

$$\zeta^2 + \frac{d\zeta}{dy} + \frac{E - \tilde{V}(y)}{(F(y))^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{F''(y)}{F(y)} \right) + \frac{1}{4} \left(\frac{F'(y)}{F(y)} \right)^2 = 0. \quad (3.2.4)$$

La fonction moment quantique ζ possède n pôles mobiles avec des résidus de valeur égale à 1.

A présent, on se sert de l'équation (3.2.4) au lieu de (3.2.1) pour un potentiel quelconque et on procède de la même manière que pour l'oscillateur harmonique [9, 10].

Le potentiel de Rosen-Morse est donné par

$$V(x) = A^2 - A(A + \alpha) \operatorname{sech}^2(\alpha x) \quad (3.2.5)$$

tel que $A > 0$, $\operatorname{sech} x = \frac{1}{\cosh x}$ et α une constante.

On fait le changement de variable $y = \tanh(\alpha x)$ et tenant compte des équations (3.2.3) et du fait que $\alpha x = \arg \tanh(y) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+y}{1-y} \right)$, on aboutit au résultat suivant

$$\zeta^2 + \frac{d\zeta}{dy} + \frac{E - A^2 + \alpha^2}{\alpha^2 (1 - y^2)^2} + \frac{A(A + \alpha)}{\alpha^2 (1 - y^2)^2} = 0 \quad (3.2.6)$$

La fonction ζ possède n pôles mobiles et des pôles fixes en $y = \pm 1$. Suivant la même procédure que pour l'oscillateur harmonique, on écrit $\zeta(y)$ comme une somme des parties

principales du développement de Laurent autour de chaque singularité plus une constante

$$\zeta(y) = \frac{r_1}{y-1} + \frac{r'_1}{y+1} + \frac{S'_n}{S_n} + C \quad (3.2.7)$$

où r_1 et r'_1 sont les résidus de $\zeta(y)$ en $y = \pm 1$ et $S_n = \prod_{k=1}^n (y - y_k)$. Pour calculer r_1 , on effectue un développement de Laurent autour de $y = 1$

$$\zeta(y) \approx \frac{r_1}{y-1} + \dots$$

et on remplace ce développement dans (3.2.6) puis par comparaison des termes des facteurs de $\frac{1}{(y-1)^2}$, on abouti à [9, 10]

$$r_1 = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{A^2 - E}}{2\alpha} \quad (3.2.8)$$

En procédant de la même façon pour l'autre résidu, on arrive à

$$r'_1 = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{A^2 - E}}{2\alpha} \quad (3.2.9)$$

Les signes \pm dans (3.2.8) et (3.2.9) constituent une ambiguïté qu'il faut éliminer. A ce niveau, on trouve que dans la littérature plusieurs conditions sont utilisées pour fixer le signe des résidus. On peut faire appel à la condition (2.2.6) ou à des conditions imposées sur la fonction d'onde. Kapoor et al. utilisent une condition sur le superpotentiel $\mathcal{W}(x)$. Ce dernier est relié à un potentiel supersymétrique $V(x)$ par

$$V(x) = \mathcal{W}^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \frac{d}{dx} \mathcal{W}(x)$$

Dans le cas présent du potentiel de Rosen-Morse qui est un potentiel supersymétrique, on se sert de la condition aux limites suivantes

$$\lim_{E \rightarrow 0} K(y) = -\mathcal{W}(y) \quad (3.2.10)$$

où $\mathcal{W} = A \tanh(\alpha x)$ et $\mu = 1$. Ainsi les bonnes valeurs de ces résidus sont [9, 10]

$$\begin{cases} r_1 = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{A^2 - E}}{2\alpha} \\ r'_1 = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{A^2 - E}}{2\alpha} \end{cases} \quad (3.2.11)$$

En reportant ces nouvelles valeurs dans l'expression (3.2.7) de $\zeta(y)$, puis par substitution de cette dernière dans l'équation (3.2.6) et par comparaison des coefficients $\frac{1}{y}$ et ceux de $\frac{1}{y^2}$ pour un large y , on aura

$$\begin{cases} C = 0, \\ E_n = A^2 - A(A - n\alpha)^2 \end{cases} \quad (3.2.12)$$

La deuxième relation représente le spectre d'énergie. En utilisant le résultat précédent dans (3.2.6), on arrive à l'équation différentielle suivante :

$$\begin{aligned} \frac{S''}{S} + \frac{2S'y}{S} \left(\frac{\alpha + \sqrt{A^2 - E}}{\alpha(y^2 - 1)} \right) + \frac{(\alpha + \sqrt{A^2 - E})^2}{2\alpha^2(y^2 - 1)} \\ - \frac{E - A^2 + \alpha^2}{2\alpha^2(y^2 - 1)} - \frac{A(A + \alpha)}{\alpha^2(y^2 - 1)} = 0 \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

Par substitution de la valeur de l'énergie dans l'équation ci-dessus, on retrouve l'équation différentielle des polynômes de Jacobi S :

$$(1 - y^2) S'' - y(\mu + \nu + 2) S' + n(\mu + \nu + n + 1) S = 0 \quad (3.2.14)$$

S est identifié à un polynôme de Jacobi [11] et sera noté $S_n^{\mu, \nu}(y)$ avec $\mu = \nu = \frac{A}{\alpha} - n$. Les fonctions d'ondes des états liés sont obtenues en portant (3.2.3) dans (2.3.11)

$$\psi(y) = \exp \left(\int \zeta(y) dy + \frac{y}{1 - y^2} dy \right) \quad (3.2.15)$$

avec,

$$\zeta(y) = \frac{\alpha + \sqrt{A^2 - E}}{2\alpha(y - 1)} + \frac{\alpha + \sqrt{A^2 - E}}{2\alpha(y + 1)} + \frac{S'}{S} \quad (3.2.16)$$

Ainsi de (3.2.15), on retrouve les fonctions propres du potentiel de Morse [9, 10]

$$\psi_n(y) = N (1-y)^{\frac{\mu}{2}} (1+y)^{\frac{\nu}{2}} S_n^{\mu,\nu}(y) \quad (3.2.17)$$

où N est une constante de normalisation.

3.3 Le potentiel de Scarf-I (trigonométrique)

Le potentiel de Scarf-I fait partie des potentiels supersymétriques. Son expression est [9, 10]

$$V_-(x) = -A^2 + (A^2 + B^2 - A\alpha\hbar) \sec^2 \alpha x - B(2A - \alpha\hbar) \tan \alpha x \sec \alpha x \quad (3.3.1)$$

En remplaçant la fonction moment quantique p par $-iK$ l'équation (2.3.1) devient :

$$\begin{aligned} k^2 + \hbar \frac{dK}{dx} + E + A^2 - (A^2 + B^2 - A\alpha\hbar) \sec^2 \alpha x \\ + B(2A - \alpha\hbar) \tan \alpha x \sec \alpha x = 0 \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

Les étapes utilisés sont celles de la procédure expliquée dans la section précédente. En adoptant le changement de variable

$$y = \sin \alpha x \quad (3.3.3)$$

et faisant appel à la fonction moment quantique $\zeta(y)$ au lieu de K , on trouve

$$\begin{aligned} \zeta^2 + \hbar \frac{d\zeta}{dy} \frac{y^2 \hbar^2}{4(1-y^2)^2} + \frac{E^2 + A^2}{\alpha^2 (1-y^2)} + \\ \frac{\alpha^2 \hbar^2 - 2(A^2 + B^2 - A\alpha\hbar)}{2\alpha^2 (1-y^2)^2} + \frac{B(2A - \alpha\hbar)y}{\alpha^2 (1-y^2)^2} = 0 \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

Cette fonction a des pôles fixes en $y = \pm 1$. On reprend l'écriture usuelle de la fonction moment quantique comme

$$\zeta(y) = \frac{r_1}{y-1} + \frac{r'_1}{y+1} + \hbar \frac{S'}{S} + C \quad (3.3.5)$$

où r_1 et r'_1 sont les résidus aux points $y = \pm 1$. Les valeurs de r_1 en $y = 1$ sont

$$r_1 = \frac{A-B}{2\alpha} + \frac{\hbar}{4} \quad \text{et} \quad r_1 = -\frac{(A-B)}{2\alpha} + \frac{3\hbar}{4} \quad (3.3.6)$$

les valeurs de r'_1 en $y = -1$ sont

$$r'_1 = \frac{A+B}{2\alpha} + \frac{\hbar}{4} \quad \text{et} \quad r'_1 = -\frac{(A+B)}{2\alpha} + \frac{3\hbar}{4} \quad (3.3.7)$$

Premier cas : $A+B > 0$, $A-B > 0$. Pour ce choix des paramètres de A et B , les résidus sont

$$r_1 = \frac{A-B}{2\alpha} + \frac{\hbar}{4}, \quad r'_1 = \frac{A+B}{2\alpha} + \frac{\hbar}{4} \quad (3.3.8)$$

En mettant ces valeurs dans (3.3.5), ça donne

$$\zeta(y) = \left(\frac{A-B}{2\alpha} + \frac{\hbar}{4} \right) \frac{1}{y-1} + \left(\frac{A+B}{2\alpha} + \frac{\hbar}{4} \right) \frac{1}{y+1} + \frac{\hbar S'}{S} \quad (3.3.9)$$

En reportant ce resultat dans (3.3.4), on retrouve les énergies propres sous la forme :

$$E_n = (A + n\alpha)^2 - A^2 \quad (3.3.10)$$

L'équation du polynome S aura la forme

$$(1-y^2) S'' + (\mu - \nu - (\mu + \nu + 1)y) S' + n(n + \mu + \nu) S = 0 \quad (3.3.11)$$

où $\mu = \frac{A-B}{\alpha}$ et $\nu = \frac{A+B}{\alpha}$. Cette équation a la forme de l'équation différentielle de Jacobi, ainsi S coïncide avec le polynôme de Jacobi $S_n^{\mu-1/2, \nu-1/2}$. La fonction d'onde de

l'état lié s'écrit alors [11]

$$\psi_n(y) = N (1-y)^{\frac{\mu}{2}} (1+y)^{\frac{\nu}{2}} S^{\mu-\frac{1}{2}, \nu-\frac{1}{2}}(y) \quad (3.3.12)$$

Deuxième cas : $A - B > 0$, $A + B < 0$, pour ce choix de paramètres, les résidus sont

$$r_1 = \frac{A - B}{2\alpha} + \frac{\hbar}{4}, \quad r_1' = -\frac{A + B}{2\alpha} + \frac{3\hbar}{4} \quad (3.3.13)$$

Par substitution de $\zeta(y)$ avec ces valeurs dans (3.3.4) et pour ($\hbar = 1$), on trouve les énergies propres sous la forme :

$$E_n = \left[B - \left(n + \frac{1}{2} \right) \alpha \right]^2 - A^2 \quad (3.3.14)$$

et l'équation différentielle pour S prend la forme

$$(1-y^2) S'' + [(\mu - \nu + 1) - y(\mu + \nu + 2)] S' + n(n+1 + \mu + \nu) S = 0 \quad (3.3.15)$$

Cette équation est aussi une équation différentielle de Jacobi. Ainsi la fonction d'onde de l'état lié est donnée par

$$\psi_n(y) = N (1-y)^{\frac{\mu}{2}} (1+y)^{\frac{\nu}{2}-\frac{1}{2}} S_n^{\nu+\frac{1}{2}, \mu-\frac{1}{2}}(y) \quad (3.3.16)$$

où $\mu = \frac{A-B}{\alpha}$ et $\nu = \frac{A+B}{\alpha}$.

3.4 L'oscillateur de Morse

Le potentiel de l'oscillateur de Morse est donné par [9, 10]

$$V(x) = A^2 + B^2 e^{-2\alpha x} - 2B \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) e^{-\alpha x} \quad (3.4.1)$$

alors que le superpotentiel correspondant est :

$$W(x) = A - Be^{-\alpha x}. \quad (3.4.2)$$

Par commodité, on pose :

$$d = \frac{A}{\alpha} \quad (3.4.3)$$

pour s'en servir dans l'expression de la fonction d'onde.

La fonction de Hamilton-Jacobi est donnée ($2\mu = \hbar = 1$) par

$$p^2(x, E) - ip'(x, E) - \left[E - A^2 - B^2 e^{-2\alpha x} + 2B \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) e^{-\alpha x} \right] = 0 \quad (3.4.4)$$

On effectue le changement de variable suivant

$$y = \frac{2B}{\alpha} e^{-\alpha x} \quad (3.4.5)$$

et en l'injectant dans (3.4.4), on trouve

$$\tilde{p}^2(y, E) + i\alpha y \tilde{p}'(y, E) - \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] = 0 \quad (3.4.6)$$

En définissant la relation

$$\tilde{p}(y, E) = i\alpha y \varphi(y, E) \quad (3.4.7)$$

l'équation (3.4.6) devient

$$\left(\varphi + \frac{1}{2y} \right)^2 + \varphi' - \frac{1}{4y^2} + \frac{1}{\alpha^2 y^2} \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2}{4} y^2 + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] = 0 \quad (3.4.8)$$

On pose :

$$\zeta(y, E) = \varphi(y, E) + \frac{1}{2y} \quad (3.4.9)$$

ainsi l'équation (3.4.8) devient

$$\zeta^2 + \frac{1}{4y^2} + \zeta' + \frac{1}{\alpha^2 y^2} \left[E - A^2 - \frac{\alpha^2 y^2}{4} + \left(A + \frac{\alpha}{2} \right) \alpha y \right] = 0. \quad (3.4.10)$$

D'après cette équation on voit bien que ζ possède un pôle à $y = 0$; elle aura aussi n pôles mobiles qui correspondent aux noeuds de la fonction d'onde. On assume qu'il n'y a pas d'autres pôles dans le plan complexe fini. Dans la première section de ce chapitre, on a montré qu'on peut écrire ζ de la façon suivante [5, 9, 10]

$$\zeta(y) = \frac{r_1}{y} + \frac{S'(y)}{S(y)} + c. \quad (3.4.11)$$

Le calcul du résidu de ζ en $y = 0$ donne

$$r_1 = \frac{A}{\alpha} + \frac{1}{2} \quad (3.4.12)$$

Ainsi, la substitution de la valeur (3.4.11) dans le développement (3.4.10) permet à (3.4.10) de se mettre sous la forme

$$\frac{S''}{S} + 2\frac{r_1}{y}\frac{S'}{S} + 2\frac{S'}{S}c + 2\frac{r_1}{y}c + c^2 - \frac{1}{4} + \frac{1}{\alpha y}\left(A + \frac{\alpha}{2}\right) = 0 \quad (3.4.13)$$

Tout d'abord, on peut considérer le comportement de chaque terme de l'équation précédente pour un grand y

$$\frac{S''(y)}{S(y)} \sim \frac{n(n-1)}{y^2}, \quad \frac{S'(y)}{S(y)} \sim \frac{n}{y}$$

Cela nous permet de déduire que :

$$2r_1c + 2nc + \left(A + \frac{\alpha}{2}\right)\frac{1}{\alpha} = 0 \quad (3.4.14)$$

Après substitution des valeurs de r_1 et de c et simplification, on aura l'expression de l'énergie propre comme :

$$E_n = A^2 - (A - n\alpha)^2. \quad (3.4.15)$$

En reportant les valeurs de r_1 et de c dans (3.4.13), on trouve

$$yS''(y) + [1 - y + 2(s - n)]S'(y) + nS(y) = 0 \quad (3.4.16)$$

cette dernière correspond à l'équation différentielle de Laguerre [11]

$$xy'' + (\beta + 1 - x)y' + ny = 0$$

ce qui nous permet d'écrire

$$S(y) \equiv L_{\beta}^n(y).$$

La fonction d'onde de l'oscillateur de Morse est donnée par

$$\psi(x) = \exp\left(i \int p(x, E) dx\right) \quad (3.4.17)$$

En termes de la variable y , l'expression précédente conduit à

$$\psi(y) = \exp\left(i \int \left[\frac{r_1}{y} + \frac{S'(x)}{S(x)} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2y}\right] dy\right) \quad (3.4.18)$$

Après intégration et simplification

$$\psi_n(y) = y^{d-n} \exp\left(-\frac{1}{2}y\right) S(x) \quad (3.4.19)$$

tout en remplaçant la valeur de $S(y)$, on retrouve les fonctions propres [5, 9, 10] :

$$\psi_n(y) = y^{d-n} \exp\left(-\frac{1}{2}y\right) L_{\beta}^n(y). \quad (3.4.20)$$

3.5 Le potentiel de Poschl-Teller

L'expression de ce potentiel est de la forme suivante [5, 9, 10]

$$V(x) = A^2 + (A^2 + B^2 + A\alpha) \operatorname{csch}^2 \alpha x - B(2A + \alpha) \coth \alpha x \operatorname{csch} \alpha x \quad (3.5.1)$$

où $\operatorname{csch} x = \frac{1}{\sinh x} = \frac{2}{e^x - e^{-x}}$. Le super potentiel correspondant est

$$W(x) = A \coth \alpha x - B \operatorname{csch} \alpha x, \quad (A < B) \quad (3.5.2)$$

et on pose

$$d = \frac{A}{\alpha}, \quad \lambda = \frac{\beta}{\alpha}. \quad (3.5.3)$$

L'équation de la fonction moment quantique devient

$$p^2(x, E) - ip'(x, E) = [E - A^2 - (A^2 + B^2 + A\alpha) \operatorname{csch}^2 \alpha x] \\ - B(2A + \alpha) \operatorname{coth} \alpha x \operatorname{csch} \alpha x \quad (3.5.4)$$

On effectue le changement de variable suivant

$$y = \cosh \alpha x \quad (3.5.5)$$

Ainsi l'équation (3.5.4) prend la forme

$$\tilde{p}^2(y, E) - i\alpha\sqrt{y^2 - 1}\tilde{p}'(y, E) = \left[E - A^2 - (A^2 + B^2 + A\alpha) \frac{1}{y^2 - 1} \right. \\ \left. + B(2A + \alpha) \frac{y}{y^2 - 1} \right] \quad (3.5.6)$$

En introduisant la fonction

$$\tilde{p}(y, E) = -i\alpha\sqrt{y^2 - 1}\varphi(y) \quad (3.5.7)$$

ainsi (3.5.6) devient

$$\left(\varphi + \frac{1}{2} \frac{y}{y^2 - 1} \right)^2 + \varphi' - \frac{1}{4} \frac{y^2}{(y^2 - 1)^2} + \frac{1}{\alpha^2 (y^2 - 1)} [E - A^2 \\ - (A^2 + B^2 + A\alpha) \frac{1}{y^2 - 1}] + \frac{1}{\alpha^2 (y^2 - 1)} \left[B(2A + \alpha) \frac{y}{y^2 - 1} \right] = 0 \quad (3.5.8)$$

De plus, on posant :

$$\zeta(y) = \varphi(y) + \frac{1}{2} \frac{y}{y^2 - 1} \quad (3.5.9)$$

tout en substituant dans (3.5.8), ça donne

$$\begin{aligned} \zeta^2 + \zeta' + \frac{3}{4} \frac{y^2}{(y^2 - 1)^2} - \frac{1}{2} \frac{1}{y^2 - 1} \\ + \frac{1}{\alpha^2 (y^2 - 1)} \left[+B(2A + \alpha) \frac{y}{y^2 - 1} \right] \\ + \frac{1}{\alpha^2 (y^2 - 1)} \left[E - A^2 - (A^2 + B^2 + A\alpha) \frac{1}{y^2 - 1} \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.5.10)$$

Ainsi la fonction ζ possède des pôles fixes à $y = \pm 1$. A présent, on va calculer les résidus de ces pôles.

pour $y = 1$, on écrit

$$\zeta = \frac{r_1}{y - 1} + a_0 + a_1 (y - 1) + \dots \quad (3.5.11)$$

En injectant cette dernière équation dans (3.5.10) et en comparant les coefficients de $\frac{1}{(y-1)^2}$, on aura

$$r_1 = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\alpha} (A - B) \quad (3.5.12)$$

Pour $y = -1$, on introduit plutôt le développement

$$\zeta = \frac{r'_1}{y + 1} + a'_0 + a'_1 (y + 1) + \dots \quad (3.5.13)$$

Par substitution de cette dernière dans (3.5.10) et par comparaison des coefficients de $\frac{1}{(y+1)^2}$, on trouve [5, 9, 10] :

$$r'_1 = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\alpha} (A + B) \quad (3.5.14)$$

Ainsi ζ se met sous la forme suivante

$$\zeta = \frac{r_1}{y - 1} + \frac{r'_1}{y + 1} + \frac{S'(y)}{S(y)} + c \quad (3.5.15)$$

où c est une constante à déterminer.

La substitution de (3.5.15) dans (3.5.10) conduit à l'équation suivante

$$\begin{aligned}
c^2 + \frac{2r_1 r_1'}{y^2 - 1} + \frac{2r_1' S'}{y + 1} + \frac{2S'}{S} c + \frac{2r_1 c}{y - 1} \\
+ \frac{2r_1 S'}{y - 1} + \frac{2r_1' c}{y + 1} - \frac{1}{2(y^2 - 1)} + \frac{S''}{S} \frac{3}{8(y^2 - 1)} \\
+ \frac{1}{\alpha^2} (E - A^2) \frac{1}{(y^2 - 1)} + \frac{1}{2\alpha^2} (A^2 + B^2 + A\alpha) \frac{1}{(y^2 - 1)} = 0 \quad (3.5.16)
\end{aligned}$$

Pour de grand y , on trouve que $c = 0$, ainsi l'équation précédente devient

$$\begin{aligned}
\frac{S'}{S} \left[\frac{2r_1}{y - 1} + \frac{2r_1'}{y + 1} \right] + \frac{2r_1 r_1'}{y^2 - 1} - \frac{1}{2} \frac{1}{y^2 - 1} + \frac{S''}{S} \frac{3}{8} \frac{1}{y^2 - 1} \\
+ \frac{1}{\alpha^2} (E - A^2) \frac{1}{y^2 - 1} + \frac{1}{2\alpha^2} (A^2 + B^2 + A\alpha) \frac{1}{y^2 - 1} = 0 \quad (3.5.17)
\end{aligned}$$

Pour un grand y , $S(y)$ se comporte comme $S(y) \sim y^n + \dots$ et par conséquent on a $\frac{S''(y)}{S(y)} \sim \frac{n(n-1)}{y^2}$ et $\frac{S'(y)}{S(y)} \sim \frac{n}{y}$.

En utilisant ces comportements asymptotiques dans (3.5.17) et en comparant les coefficients de $\frac{1}{y^2}$, on trouve

$$2r_1 r_1' + 2nr_1' + 2nr_1 + n(n-1) + \frac{3}{8} + \frac{1}{\alpha^2} (E - A^2) + \frac{1}{2\alpha^2} (A^2 + B^2 + A\alpha) - \frac{1}{2} = 0$$

En remplaçant les valeurs de r_1 et de r_1' dans cette dernière équation, on retrouve l'expression de l'énergie propre :

$$E = A^2 - (A - n\alpha)^2 \quad (3.5.18)$$

Par substitution des valeurs de E , r_1 et r_1' dans (3.5.17), on aboutit à l'équation différentielle

$$(1 - y^2) S''(y) + [(2s - 1)y - 2\lambda] S'(y) + [n(n - 2s)] S(y) = 0 \quad (3.5.19)$$

qui n'est autre que l'équation polynômiale standard de Jacobi [11], ainsi

$$S(y) \equiv S_n^{(\alpha, \beta)}(y) = S_n^{(\lambda-d-\frac{1}{2}, -\lambda-d-\frac{1}{2})}(y) \quad (3.5.20)$$

Enfin la fonction d'onde du potentiel de Poschl-Teller [11] est donnée par [5, 9, 10] :

$$\psi(y) = N (y-1)^{\frac{\lambda-d}{2}} (y+1)^{-\frac{(\lambda+d)}{2}} S_n^{(\lambda-d-\frac{1}{2}, -\lambda-d-\frac{1}{2})}(y). \quad (3.5.21)$$

3.6 Conclusion

L'objectif principal de ce chapitre est de retrouver les solutions analytiques de l'équation de Schrödinger pour quelques potentiels à une dimension et cela par le moyen du technique de Kapoor et al.

Application au potentiel coulombien

4.1 Introduction

Dans le présent chapitre, nous allons procéder à la résolution de l'équation de Schrödinger pour le potentiel coulombien. Ce dernier constitue le modèle théorique pour décrire l'atome d'hydrogène. Ce traitement analytique va se faire dans le cadre de la version améliorée de Kapoor et al. du formalisme de Hamilton-Jacobi Quantique, et cela après séparation des variables angulaires et radiales.

4.2 Equation de Hamilton-Jacobi quantique à 3D

L'équation de Schrödinger stationnaire à trois dimensions est :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (4.2.1)$$

où $V(\vec{r})$ est le potentiel donné et μ est la masse.

Pour un potentiel central $V(r)$, l'équation précédente est séparable en coordonnées sphériques. Aussi, la fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\psi(\vec{r}) = \frac{R(r)}{r} \frac{H(\theta)}{\sqrt{\sin \theta}} e^{im\varphi} \quad (4.2.2)$$

où m est un entier et les fonctions $R(r)$ et $H(\theta)$ respectent les conditions aux limites suivantes

$$R(r=0) = 0 \text{ et } R(r=\infty) = 0$$

$$H(\theta=0) = 0 \text{ et } H(\theta=\pi) = 0$$

Dans le formalisme de Hamilton-Jacobi quantique, $\psi(\vec{r})$ s'écrit comme

$$\psi(\vec{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}W(\vec{r})} \quad (4.2.3)$$

avec $W(\vec{r})$ est la fonction caractéristique de Hamilton.

En substituant cette dernière équation dans (4.2.1), on aura

$$\frac{\hbar}{i} \Delta W(\vec{r}) + \left(\vec{\nabla} W(\vec{r}) \right)^2 = 2\mu(E - V(r)) \quad (4.2.4)$$

qui est l'équation de Hamilton-Jacobi correspondante à l'équation de Schrödinger.

En se plaçant en coordonnées sphériques et en adoptant la séparation des variables, la fonction $W(\vec{r})$ s'écrit alors comme suit :

$$W(\vec{r}) = W(r, \theta, \varphi) = W_r(r) + W_\theta(\theta) + W_\varphi(\varphi) \quad (4.2.5)$$

Les expressions de Δ et de $\vec{\nabla}$ en coordonnées sphériques sont :

$$\vec{\nabla} f = \frac{\partial f}{\partial r} \vec{u}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \vec{u}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \vec{u}_\varphi$$

et

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}^2 f = \Delta f &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial f}{\partial \theta} \sin \theta \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \\ &= \left(\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \end{aligned}$$

Par substitution dans (4.2.4), on trouve que

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar}{i} \left(\left(\frac{\partial^2 W_r}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial W_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2 W_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 W_\varphi}{\partial \varphi^2} \right) \\
+ \left(\frac{\partial W_r}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial W_\varphi}{\partial \varphi} \right)^2 \\
= 2\mu(E - V(r)) \quad (4.2.6)
\end{aligned}$$

On procède à la séparation des variables radiales et angulaires de telle sorte à réécrire (4.2.6) comme suit

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar}{i} r^2 \left(\frac{\partial^2 W_r}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial W_r}{\partial r} \right) + r^2 \left(\frac{\partial W_r}{\partial r} \right)^2 - r^2 2\mu(E - V(r)) = \\
-\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial^2 W_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right) - \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 W_\varphi}{\partial \varphi^2} \\
- \left(\frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right)^2 - \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial W_\varphi}{\partial \varphi} \right)^2 = -a \quad (4.2.7)
\end{aligned}$$

où a est une constante de séparation.

Alors de (4.2.7), on tire l'équation radiale

$$\frac{\hbar}{i} r^2 \left(\frac{\partial^2 W_r}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial W_r}{\partial r} \right) + r^2 \left(\frac{\partial W_r}{\partial r} \right)^2 - r^2 2\mu(E - V(r)) = -a$$

En divisant les membres de cette équation par r^2 , on aboutit alors à

$$\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial^2 W_r}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial W_r}{\partial r} \right) + \left(\frac{\partial W_r}{\partial r} \right)^2 = 2\mu(E - V(r)) - \frac{a}{r^2} \quad (4.2.8)$$

On tire aussi de (4.2.7) l'équation angulaire suivante :

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial^2 W_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right) - \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 W_\varphi}{\partial \varphi^2} \\
- \left(\frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right)^2 - \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial W_\varphi}{\partial \varphi} \right)^2 = -a \quad (4.2.9)
\end{aligned}$$

En mettant les termes dépendants de θ d'un côté et les termes dépendants de φ de l'autre tout en multipliant par $\sin^2 \theta$, on aboutit alors à :

$$-\frac{\hbar}{i} \sin^2 \theta \left(\frac{\partial^2 W_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right) - \sin^2 \theta \left(\frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right)^2 + a \sin^2 \theta = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2 W_\varphi}{\partial \varphi^2} + \left(\frac{\partial W_\varphi}{\partial \varphi} \right)^2 = b \quad (4.2.10)$$

b est une constante de séparation.

A présent, nous sommes en mesure d'écrire les équations différentielles relativement à φ

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2 W_\varphi}{\partial \varphi^2} + \left(\frac{\partial W_\varphi}{\partial \varphi} \right)^2 = b \quad (4.2.11)$$

et à la variable θ

$$-\frac{\hbar}{i} \sin^2 \theta \left(\frac{\partial^2 W_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right) - \sin^2 \theta \left(\frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} \right)^2 + a \sin^2 \theta = b \quad (4.2.12)$$

On a par définition :

$$\vec{p} = \vec{\nabla} W(\vec{r}) \quad (4.2.13)$$

En coordonnées sphériques, \vec{p} s'écrit comme suit

$$p_r = \frac{\partial W_r}{\partial r}, p_\theta = \frac{\partial W_\theta}{\partial \theta}, p_\varphi = \frac{\partial W_\varphi}{\partial \varphi}$$

où p_r , p_θ et p_φ sont les moments conjugués quantiques.

En portant l'expression de p_r dans (4.2.8), on aura

$$\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial p_r}{\partial r} + \frac{2}{r} p_r \right) + (p_r)^2 = 2\mu (E - V(r)) - \frac{a}{r^2} \quad (4.2.14)$$

De la même manière, en substituant les expressions de p_φ et de p_θ dans (4.2.11) et (4.2.13) respectivement, on aura les équations suivantes

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p_\varphi}{\partial \varphi} + (p_\varphi)^2 = b \quad (4.2.15)$$

$$\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial p_\theta}{\partial \theta} + \frac{1}{\tan \theta} p_\theta \right) + (p_\theta)^2 = a - \frac{b}{\sin^2 \theta} \quad (4.2.16)$$

De (4.2.3) et (4.2.5), on peut écrire $\psi(\vec{r})$ comme

$$\psi(\vec{r}) = e^{\frac{i}{\hbar} W(\vec{r})} = e^{\frac{i}{\hbar} (W_r(r) + W_\theta(\theta) + W_\varphi(\varphi))} \quad (4.2.17)$$

Par comparaison de la forme de la fonction d'onde (4.2.17) et (4.2.2), on trouve :

$$e^{\frac{i}{\hbar} W_\varphi(\varphi)} = e^{im\varphi}$$

ce qui amène à

$$W_\varphi(\varphi) = \hbar m \varphi$$

d'où

$$p_\varphi = \hbar m$$

En injectant ce dernier résultat dans (4.2.15), on évalue la constante de séparation

$$b = \hbar^2 m^2 \quad (4.2.18)$$

4.3 La solution radiale

Pour la solution radiale, nous allons nous intéresser au potentiel coulombien

$$V(r) = -\frac{ke^2}{r} \quad (4.3.1)$$

Par comparaison des relatons (4.2.2) et (4.2.17), il vient que

$$e^{\frac{i}{\hbar}W_r(r)} = \frac{R(r)}{r} \quad (4.3.2)$$

En introduisant la fonction logarithmique sur les deux côtés de cette dernière équation et en dérivant par rapport à r , on obtient :

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial W_r(r)}{\partial r} = \frac{R'(r)}{R(r)} - \frac{1}{r}$$

Soit :

$$p_r = \frac{\partial W_r(r)}{\partial r} = \frac{\hbar}{i} \frac{R'(r)}{R(r)} - \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \quad (4.3.3)$$

On pose $\tilde{p}_r = \frac{\hbar}{i} \frac{R'(r)}{R(r)}$, pour écrire

$$p_r = \tilde{p}_r - \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \quad (4.3.4)$$

Par substitution de (4.3.4) dans le premier membre de (4.2.14), on aboutit à :

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial p_r}{\partial r} + \frac{2}{r} p_r \right) + (p_r)^2 &= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial \tilde{p}_r}{\partial r} + \frac{2}{r} \tilde{p}_r + \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r^2} - \frac{2\hbar}{i} \frac{1}{r^2} \right) + \left(\tilde{p}_r^2 - \frac{\hbar^2}{r^2} - \frac{2\hbar}{i} \frac{\tilde{p}_r}{r} \right) \\ &= \tilde{p}_r^2 + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{p}_r}{\partial r} \end{aligned}$$

nous avons donc :

$$\tilde{p}_r^2 + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{p}_r}{\partial r} = 2\mu \left(E + \frac{ke^2}{r} \right) - \frac{a}{r^2} \quad (4.3.5)$$

On remarque d'après cette équation que \tilde{p}_r a un seul résidu fixe en $r = 0$ et n_r pôles mobiles . Ainsi on peut écrire \tilde{p}_r , comme dans le cas de l'oscillateur harmonique, comme suit [5]

$$\tilde{p}_r = \frac{\hbar}{i} \frac{S'_{n_r}(r)}{S_{n_r}(r)} + \frac{g}{r} + c \quad (4.3.6)$$

où g est le résidu de \tilde{p}_r en $r = 0$.

Le développement de Laurent de \tilde{p}_r autour de $r = 0$ est le suivant

$$\tilde{p}_r = \frac{g}{r} + a_0 + a_1 r + \dots \approx \frac{g}{r} + a_0$$

En remplaçant ce développement dans (4.3.5), ça donne

$$\frac{1}{r^2} g^2 + a_0^2 + \frac{2}{r} a_0 g - \frac{\hbar}{i} \frac{g}{r^2} - \left(E + \frac{e^2}{r} - \frac{a}{r^2} \right) = 0$$

Par comparaison des termes en $\frac{1}{r^2}$, on en déduit que

$$g^2 + i\hbar g + a = 0$$

ce qui donne :

$$g = \frac{-i\hbar \pm i\hbar \sqrt{1 + 4\frac{a}{\hbar^2}}}{2} \quad (4.3.7)$$

Détermination du bon signe du résidu g On a $R(r) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int \tilde{p}_r dr\right)$, avec $R(r \rightarrow 0) = 0$.

Le développement de Laurent de \tilde{p}_r au voisinage de 0 est donné par : $\tilde{p}_r \approx \frac{g}{r} + a_0$, et en effectuant le changement de variable $y = \frac{1}{r}$ ($y \rightarrow \infty$, pour $r \rightarrow 0$), ce développement se transforme au voisinage de l'infini à : $\tilde{p}_y(y) \approx gy$, de sorte que :

$$\begin{aligned} R(r) &= \exp \frac{i}{\hbar} \int \tilde{p}_r dr \rightarrow R(y) = \exp \frac{i}{\hbar} \int \tilde{p}_y \left(-\frac{dy}{y^2} \right) \approx \exp \frac{i}{\hbar} \int gy \left(-\frac{dy}{y^2} \right) \\ &= \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int \frac{g}{y} dy = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int \left(\frac{-i\hbar \pm i\hbar \sqrt{1 + 4\frac{a}{\hbar^2}}}{2y} \right) dy \\ &= \exp \int \left(\frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4\frac{a}{\hbar^2}}}{2y} \right) dy = y^{-\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4\frac{a}{\hbar^2}}} \end{aligned}$$

Pour $y \rightarrow \infty$: $R(r) \rightarrow 0$ si $R(r) = y^{-\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4\frac{a}{\hbar^2}}}$, donc la valeur admissible est

$$g = -\frac{i\hbar}{2} - \frac{i\hbar}{2} \sqrt{1 + 4\frac{a}{\hbar^2}} = -i\hbar(l + 1) \quad (4.3.8)$$

Calcul de la constante c La substitution de (4.3.6) dans (4.3.5) donne

$$\begin{aligned} \tilde{p}_r^2 + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{p}_r}{\partial r} - \left(E + \frac{ke^2}{r} - \frac{a}{r^2} \right) &= \frac{g^2}{r^2} + c^2 - \hbar^2 \frac{S_{n_r}^{\prime 2}}{S_{n_r}^2} + 2c \frac{g}{r} - 2i\hbar c \frac{S_{n_r}'}{S_{n_r}} \\ - 2i\hbar \frac{g}{r} \frac{S_{n_r}'}{S_{n_r}} + \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{S_{n_r}''}{S_{n_r}} - \frac{\hbar}{i} \frac{S_{n_r}^{\prime 2}}{S_{n_r}^2} - \frac{g}{r^2} \right] - \left(E + \frac{ke^2}{r} - \frac{a}{r^2} \right) &= 0 \end{aligned}$$

D'où :

$$-\hbar^2 \frac{S_{n_r}''}{S_{n_r}} - 2i\hbar \left(c + \frac{g}{r} \right) \frac{S_{n_r}'}{S_{n_r}} - \frac{\hbar}{i} \frac{g}{r^2} + \frac{g^2}{r^2} + \frac{a}{r^2} - \frac{ke^2}{r} + 2c \frac{g}{r} + (c^2 - E) = 0 \quad (4.3.9)$$

En tenant compte des comportements asymptotiques au voisinage de $r = 0$

$$\frac{S_{n_r}''}{S_{n_r}} \simeq \frac{n(n-1)}{r^2} \quad \text{et} \quad \frac{S_{n_r}'}{S_{n_r}} \simeq \frac{n}{r}$$

En comparant les termes constants ainsi que ceux en $\frac{1}{r}$, on aboutit à

$$c^2 = E$$

$$-2i\hbar cn_n + 2cg - ke^2 = 0$$

Donc :

$$c = \frac{ke^2}{-2i\hbar n_r - i\hbar - i\hbar \sqrt{1 + 4\frac{a}{\hbar^2}}}$$

En posant $a = \hbar^2 l(l+1)$, on trouve

$$c = \frac{ike^2}{2\hbar(n_r + l + 1)}$$

Ce qui nous permet de retrouver enfin les énergies propres

$$E = -\frac{k^2 e^4}{4\hbar^2 (n_r + l + 1)^2} = -\left(\frac{ke^2}{2\hbar(n_r + l + 1)} \right)^2 \quad (4.3.10)$$

Détermination du polynôme $S_{n_r}(r)$ En remplaçant la constante c et le résidu g dans (4.3.9), on aura :

$$-\hbar^2 \frac{S''_{n_r}}{S_{n_r}} + \left(\frac{ke^2}{(n_r + l + 1)} - \frac{2\hbar^2(l+1)}{r} \right) \frac{S'_{n_r}}{S_{n_r}} + \frac{\hbar^2(l+1)}{r} - \frac{\hbar^2(l+1)^2}{r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r} - \frac{ke^2}{r} + \frac{\frac{ke^2}{(n_r+l+1)}(l+1)}{r} = 0$$

ou encore

$$-\hbar^2 \frac{S''_{n_r}}{S_{n_r}} + \left(\frac{ke^2}{(n_r + l + 1)} - \frac{2\hbar^2(l+1)}{r} \right) \frac{S'_{n_r}}{S_{n_r}} - \frac{ke^2}{r} + \frac{\frac{ke^2}{(n_r+l+1)}(l+1)}{r} = 0$$

En multipliant les deux membres de l'équation précédente par rS_{n_r} , et en divisant par $-\hbar^2$

$$rS''_{n_r} + \left(-\frac{ke^2}{\hbar^2(n_r + l + 1)}r + 2(l+1) \right) S'_{n_r} + \frac{ke^2}{\hbar^2} \left(1 - \frac{(l+1)}{(n_r + l + 1)} \right) S_{n_r} = 0$$

On obtient l'équation différentielle

$$rS''_{n_r} + \left(-\frac{ke^2}{\hbar^2(n_r + l + 1)}r + 2(l+1) \right) S'_{n_r} + \frac{ke^2}{\hbar^2} \left(\frac{n_r}{(n_r + l + 1)} \right) S_{n_r} = 0$$

qui est sous la forme :

$$rS''_{n_r} + (-\eta r + 2(l+1)) S'_{n_r} + \eta n_r S_{n_r} = 0 \quad (4.3.11)$$

avec $\eta = \frac{ke^2}{\hbar^2(n_r+l+1)}$.

On pose

$$y = \eta r \quad (4.3.12)$$

Alors : $S_{n_r}(r) \rightarrow S_{n_r}(y)$, $S'_{n_r} = \frac{\partial S_{n_r}(r)}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial r} = \eta S'_{n_r}(y)$ et $S''_{n_r}(r) = \eta^2 S''_{n_r}(y)$

Ainsi l'équation (4.3.11) s'écrit comme suit :

$$yS''_{n_r}(y) + (1 - y + 2(l+1)) S'_{n_r}(y) + n_r S_{n_r}(y) = 0$$

C'est une équation différentielle qui a comme solution le polynôme de Laguerre généralisé [11]

$$S_{n_r}(y) = L_{n_r}^{2l+1}(y)$$

Donc

$$S_{n_r}(r) = L_{n_r}^{2l+1}(\eta r) = L_{n_r}^{2l+1}\left(\frac{ke^2}{\hbar^2(n_r + l + 1)}r\right) \quad (4.3.13)$$

A partir de l'expression intégrale de $R(r)$, on a

$$\begin{aligned} R(r) &= \exp\frac{i}{\hbar} \int \tilde{p}_r dr = \exp\frac{i}{\hbar} \int \left(\frac{\hbar S'_{n_r}(r)}{i S_{n_r}(r)} + \frac{\hbar l + 1}{i r} + \frac{ike^2}{2\hbar(n_r + l + 1)} \right) dr \\ &= \exp\left(\ln S_{n_r}(r) + \ln r^{l+1} - \frac{\eta}{2}r + C_0\right) \end{aligned} \quad (4.3.14)$$

Ce qui conduit finalement à la fonction d'onde radiale

$$R_{nl}(r) = Cr^{l+1}L_{n_r}^{2l+1}(\eta r) \exp\left(-\frac{\eta}{2}r\right) \quad (4.3.15)$$

où C est une constante de normalisation.

4.4 La solution angulaire

En comparant (4.2.2) et (4.2.17), on trouve

$$e^{\frac{i}{\hbar}W_\theta(\theta)} = \frac{H(\theta)}{\sqrt{\sin\theta}}$$

ce qui amène à

$$W_\theta(\theta) = \frac{\hbar}{i} \ln \frac{H(\theta)}{\sqrt{\sin\theta}}$$

d'où

$$p_\theta = \frac{\partial W_\theta}{\partial \theta} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\theta} \ln \frac{H(\theta)}{\sqrt{\sin\theta}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\left(\frac{H(\theta)}{\sqrt{\sin\theta}}\right)'}{\frac{H(\theta)}{\sqrt{\sin\theta}}} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{H'(\theta)}{H(\theta)} - \frac{1}{2} \cot\theta \right) \quad (4.4.1)$$

On définit une nouvelle fonction moment quantique comme suit :

$$\tilde{p}_\theta = p_\theta + \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2} \cot \theta = \frac{\hbar}{i} \frac{H'(\theta)}{H(\theta)}$$

Alors :

$$p_\theta = \tilde{p}_\theta - \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2} \cot \theta \quad (4.4.2)$$

En développant le membre gauche de (4.2.16) par l'introduction de (4.4.2), on trouve

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial p_\theta}{\partial \theta} + \frac{1}{\tan \theta} p_\theta \right) + (p_\theta)^2 &= \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial \tilde{p}_\theta}{\partial \theta} - \frac{\hbar}{2i} \left(\frac{-1}{\sin^2 \theta} \right) + \frac{\tilde{p}_\theta}{\tan \theta} - \frac{\hbar}{2i} \cot^2 \theta \right] \\ &+ \tilde{p}_\theta^2 - \frac{\hbar^2}{4} \cot^2 \theta - \frac{\hbar}{i} \tilde{p}_\theta \cot \theta \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{p}_\theta}{\partial \theta} + \tilde{p}_\theta^2 - \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sin^2 \theta} - \frac{\hbar^2}{4} \end{aligned}$$

Ainsi l'équation (4.2.16) devient

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{p}_\theta}{\partial \theta} + \tilde{p}_\theta^2 - \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sin^2 \theta} - \frac{\hbar^2}{4} = a - \frac{b}{\sin^2 \theta}$$

ou encore,

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{p}_\theta}{\partial \theta} + \tilde{p}_\theta^2 = \left(a + \frac{\hbar^2}{4} \right) + \left(\frac{\hbar^2}{4} - b \right) \frac{1}{\sin^2 \theta} \quad (4.4.3)$$

En introduisant le changement de variable $y = \cos \theta$, $\tilde{p}_\theta(\theta) \rightarrow \tilde{p}_y(y)$, l'équation (4.4.3) devient

$$-\frac{\hbar}{i} \sqrt{1-y^2} \frac{\partial \tilde{p}_y}{\partial y} + \tilde{p}_y^2 = \left(a + \frac{\hbar^2}{4} \right) + \left(\frac{\hbar^2}{4} - b \right) \frac{1}{1-y^2} \quad (4.4.4)$$

Introduisons aussi la transformation suivante

$$\tilde{p}_y = -\sqrt{1-y^2} \epsilon(y) \quad (4.4.5)$$

d'où :

$$\frac{\partial \tilde{p}_y}{\partial y} = \frac{y}{\sqrt{1-y^2}} \epsilon(y) - \sqrt{1-y^2} \epsilon'(y) \quad (4.4.6)$$

En injectant (3.4.4) et (3.4.5) dans (3.4.3), on aboutit à

$$(1 - y^2) \epsilon^2(y) - \frac{\hbar}{i} y \epsilon(y) + \frac{\hbar}{i} (1 - y^2) \epsilon'(y) = \left(a + \frac{\hbar^2}{4} \right) + \left(\frac{\hbar^2}{4} - b \right) \frac{1}{1 - y^2}. \quad (4.4.7)$$

En divisant les deux membres de (4.4.7), par $(1 - y^2)$ on aura :

$$\epsilon^2(y) - \frac{\hbar}{i} \frac{y}{1 - y^2} \epsilon(y) + \frac{\hbar}{i} \epsilon'(y) = \frac{\left(a + \frac{\hbar^2}{4} \right)}{1 - y^2} + \frac{\left(\frac{\hbar^2}{4} - b \right)}{(1 - y^2)^2} \quad (4.4.8)$$

Définissons à présent, la fonction $\zeta(y)$ telle que

$$\zeta(y) = \epsilon(y) - \frac{\hbar}{2i} \frac{y}{1 - y^2} \quad (4.4.9)$$

Par substitution de l'expression de $\epsilon(y)$ en fonction de $\zeta(y)$ dans (4.4.8), ça donne

$$\zeta^2(y) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \zeta(y)}{\partial y} - \frac{\hbar^2}{4} \frac{2 + y^2}{(1 - y^2)^2} - \frac{\left(a + \frac{\hbar^2}{4} \right)}{1 - y^2} - \frac{\left(\frac{\hbar^2}{4} - b \right)}{(1 - y^2)^2} = 0 \quad (4.4.10)$$

A présent, on peut développer la fonction $\zeta(y)$ comme suit [5]

$$\zeta(y) = \frac{r'_1}{y + 1} + \frac{r_1}{y - 1} + \frac{\hbar}{i} \frac{S'_n(y)}{S_n(y)} + c \quad (4.4.11)$$

où r_1 et r'_1 sont les résidus de $\zeta(y)$ en $y = \pm 1$ respectivement et $S_n(y)$ est un polynôme de degrés n .

Calcul des résidus r_1 et r'_1

Le résidu r_1 :

Le développement en série de Laurent de $\zeta(y)$ au voisinage de 1 est donné par

$$\zeta(y) = \frac{r_1}{y - 1} + a_0 + a_1(y - 1) + \dots \simeq \frac{r_1}{y - 1} + a_0 \quad (4.4.12)$$

En portant ce résultat dans (4.4.10), on aura

$$\frac{r_1^2}{(y-1)^2} + a_0^2 + 2\frac{r_1 a_0}{y-1} - \frac{\hbar}{i} \frac{r_1}{(y-1)^2} - \frac{\hbar}{4} \frac{2+y^2}{(1-y^2)^2} - \frac{\left(a + \frac{\hbar^2}{4}\right)}{1-y^2} + \frac{\left(\frac{\hbar^2}{4} - b\right)}{(1-y^2)^2} = 0$$

par comparaison des termes facteurs de $\frac{1}{(y-1)^2}$, conduit à l'équation

$$r_1^2 - \frac{\hbar}{i} r_1 + \frac{b}{4} - \frac{\hbar^2}{4} = 0$$

qui a les solutions suivantes

$$\begin{aligned} r_1 &= \frac{-i\hbar \pm \sqrt{-b}}{2} \\ &= \frac{-i\hbar \pm i\hbar \sqrt{\frac{b}{\hbar^2}}}{2} \end{aligned}$$

Calcul du résidu r'_1 :

En suivant la même procédure que pour r_1 , on trouve les valeurs de r'_1 comme :

$$\begin{aligned} r'_1 &= \frac{-i\hbar \pm \sqrt{-b}}{2} \\ &= \frac{-i\hbar \pm i\hbar \sqrt{\frac{b}{\hbar^2}}}{2} \end{aligned}$$

On remarque que ces résidus ont chacun deux valeurs possibles. Pour soulever cette ambiguïté et déterminer les valeurs définitives, on utilise les conditions aux limites de la fonction $H(\theta)$.

On a : $H(\theta = 0) = 0$ et $H(\theta = \pi) = 0$

Et puisque on a le changement de variable $y = \cos \theta$, alors ces conditions s'expriment

$H(y = 1) = 0$ et $H(y = -1) = 0$.

On a $H(\theta) = \exp \frac{i}{\hbar} \int \tilde{p}_\theta(\theta) d\theta$ et par le changement de variable introduit juste avant, on obtient :

$H(y) = \exp \frac{i}{\hbar} \int \tilde{p}_y(y) \frac{-dy}{\sqrt{1-y^2}} = \exp \frac{i}{\hbar} \int \epsilon(y) dy$, alors

$$H(y) = \exp \frac{i}{\hbar} \int \left[\zeta(y) + \frac{\hbar}{2i} \frac{y}{1-y^2} \right] dy \quad (4.4.13)$$

Le résidu r_1 On pose $y = 1 + \frac{1}{t} \rightarrow dy = -\frac{dt}{t^2}$.

l'expression de H devient

$$H(t) = \exp \int \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{\zeta(t)}{t^2} - \frac{1+t}{2t(2t+1)} \right] dt \quad (4.4.14)$$

En injectant l'expression $y = 1 + \frac{1}{t}$ dans le développement (4.4.12), ça donne

$$\zeta(t) = r_1 t + a_0 + \frac{r_1}{t} + \dots$$

qui indique que pour $t \rightarrow \infty : \zeta(t) \rightarrow r_1 t$, par conséquent

$$\begin{aligned} H(t) &= \exp \int \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{r_1}{t} - \frac{1+t}{2t(2t+1)} \right] dt \\ &= \exp \int \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{r_1}{t} - \frac{1}{4t} \right] dt = t^{-\frac{i}{\hbar} r_1 - \frac{1}{4}} \end{aligned}$$

Soit au voisinage de l'infini $H(t) \approx t^{-\frac{1}{4} - \frac{i}{\hbar} r_1} = t^{-\frac{1}{4} - \frac{i}{\hbar} \left[\frac{-i\hbar \pm i\hbar \sqrt{\frac{b}{\hbar^2}}}{2} \right]} = t^{-\frac{3}{4} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{b}{\hbar^2}}}$.

Alors $H(t)$ tend vers 0 quand t tend vers l'infini pour

$$r_1 = \frac{-i\hbar - i\hbar \sqrt{\frac{b}{\hbar^2}}}{2} \quad (4.4.15)$$

qui constitue la valeur définitive de r_1 .

Le résidu r'_1 On prend $y = -1 + \frac{1}{t} \rightarrow dy = -\frac{dt}{t^2}$

ainsi la relation (3.4.12) sera :

$$H(t) = \exp \int \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{\zeta(t)}{t^2} - \frac{1-t}{2t(1-2t)} \right] dt \quad (4.4.16)$$

et en suivant les mêmes étapes que pour r_1 on trouve la valeur définitive suivante de r'_1 qui est la suivante :

$$r'_1 = \frac{-i\hbar - i\hbar\sqrt{\frac{b}{\hbar^2}}}{2} \quad (4.4.17)$$

Il s'avère que $r_1 = r'_1$.

En insérant les deux valeurs des résidus dans (4.4.11), on aboutit à

$$\begin{aligned} \zeta(y) &= \frac{\hbar}{i} \frac{1+\sqrt{\frac{b}{\hbar^2}}}{y+1} + \frac{\hbar}{i} \frac{1+\sqrt{\frac{b}{\hbar^2}}}{y-1} + \frac{\hbar S'_n(y)}{i S_n(y)} + c \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(1 + \sqrt{\frac{b}{\hbar^2}}\right) \frac{y}{y^2-1} + \frac{\hbar S'_n(y)}{i S_n(y)} + c \\ &= \frac{\hbar}{i} \gamma \frac{y}{y^2-1} + \frac{\hbar S'_n(y)}{i S_n(y)} + c \end{aligned} \quad (4.4.18)$$

Détermination de la constante c En substituant (4.4.18) dans (4.4.10) il vient

$$\begin{aligned} \zeta^2(y) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \zeta(y)}{\partial y} - \frac{\hbar^2}{4} \frac{2+y^2}{(1-y^2)^2} - \frac{\left(a + \frac{\hbar^2}{4}\right)}{1-y^2} - \frac{\left(\frac{\hbar^2}{4} - b\right)}{(1-y^2)^2} = \\ - \hbar^2 \frac{\beta^2 y^2}{(1-y^2)^2} + 2c \frac{\hbar S'_n(y)}{i S_n(y)} + c^2 - 2\hbar^2 \beta \frac{y}{y^2-1} \frac{S'_n(y)}{S_n(y)} + 2c \frac{\hbar}{i} \beta \frac{y}{y^2-1} \\ + \hbar^2 \frac{\beta(1+y^2)}{(y^2-1)^2} - \hbar^2 \frac{S'_n(y)}{S_n(y)} - \frac{\hbar^2}{4} \frac{2+y^2}{(1-y^2)^2} - \frac{\left(a + \frac{\hbar^2}{4}\right)}{1-y^2} - \frac{\left(\frac{\hbar^2}{4} - b\right)}{(1-y^2)^2} = 0 \end{aligned} \quad (4.4.19)$$

en comparant les termes constants, on aura

$$c = 0 \quad (4.4.20)$$

Détermination du polynôme $S_n(y)$ En portant la valeur de c dans (4.4.19), on aura

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\beta^2 y^2}{(1-y^2)^2} - 2\hbar^2 \beta \frac{y}{y^2-1} \frac{S'_{n_\theta}(y)}{S_{n_\theta}(y)} + \hbar^2 \frac{\beta(1+y^2)}{(y^2-1)^2} \\ - \hbar^2 \frac{S''_{n_\theta}(y)}{S_{n_\theta}(y)} - \frac{\hbar^2}{4} \frac{2+y^2}{(1-y^2)^2} - \frac{\left(a + \frac{\hbar^2}{4}\right)}{1-y^2} - \frac{\left(\frac{\hbar^2}{4} - b\right)}{(1-y^2)^2} = 0 \end{aligned}$$

D'où :

$$-\hbar^2 \frac{S''_{n_\theta}(y)}{S_{n_\theta}(y)} - 2\hbar^2 \beta \frac{y}{y^2 - 1} \frac{S'_{n_\theta}(y)}{S_{n_\theta}(y)} - \frac{\hbar^2}{(1 - y^2)^2} [\beta^2 y^2 - \beta(1 + y^2) + \frac{1}{4}(2 + y^2) + \left(\frac{a}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)(1 - y^2) - \left(\frac{b}{\hbar^2} - \frac{1}{4}\right)] = 0$$

En multipliant les deux membres de cette équation par $(1 - y^2) S_{n_\theta}(y)$ et en divisant par $-\hbar^2$, on aboutit à l'équation suivante

$$(1 - y^2) S''_{n_\theta}(y) + 2\beta y S'_{n_\theta}(y) + \frac{1}{(1 - y^2)^2} [\beta^2 y^2 - \beta(1 + y^2) + \frac{1}{4}(2 + y^2) + \left(\frac{a}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)(1 - y^2) - \left(\frac{b}{\hbar^2} - \frac{1}{4}\right)] S_{n_\theta}(y) = 0$$

En remplaçant les constantes a et b par les valeurs suivantes,

$$a = \hbar^2 l(l + 1)$$

$$b = \hbar^2 m^2$$

$$\beta = 1 + m$$

on aura :

$$(1 - y^2) S''_{n_\theta}(y) + 2(1 + m) y S'_{n_\theta}(y) + \frac{1}{(1 - y^2)^2} [(1 + m)^2 y^2 - (1 + m)(1 + y^2) + \frac{1}{4}(2 + y^2) + \left(l(l + 1) + \frac{1}{4}\right)(1 - y^2) - \left(m^2 - \frac{1}{4}\right)] S_{n_\theta}(y) = 0$$

$$(1 - y^2) S''_{n_\theta}(y) + 2(1 + m) y S'_{n_\theta}(y) + \frac{1}{(1 - y^2)^2} [-m^2(1 - y^2) - m(1 - y^2) + (l(l + 1))(1 - y^2)] S_{n_\theta}(y) = 0$$

$$(1 - y^2) S''_{n_\theta}(y) + 2(1 + m) y S'_{n_\theta}(y) + [-m^2 - m + l(l + 1)] S_{n_\theta}(y) = 0$$

$$(1 - y^2) S''_{n_\theta}(y) + 2(1 + m) y S'_{n_\theta}(y) + [l^2 - m^2 + l - m] S_{n_\theta}(y) = 0$$

$$(1 - y^2) S''_{n_\theta}(y) + 2(1 + m) y S'_{n_\theta}(y) + [(l - m)(l + m + 1)] S_{n_\theta}(y) = 0$$

On peut écrire cette dernière équation comme suit

$$(1 - y^2) S''_{n_\theta}(y) + [(m - m) - (m + m + 2) y] S'_{n_\theta}(y) + (l - m) [(l - m) + m + m + 1] S_{n_\theta}(y) = 0 \quad (4.4.21)$$

cette équation a la forme suivante

$$(1 - x^2) y'' + [(\delta - \alpha) - (\delta + \alpha + 2) y] y' + n(n + \delta + \alpha + 1) = 0$$

qui est une équation différentielle admettant comme solution le polynôme de Jacobi[11]

$$y = P_{n_\theta}^{(\alpha, \delta)}(x)$$

Alors, l'équation (4.4.21) a comme solution le polynôme de Jacobi

$$S_{n_\theta=l-m}(y) = P_{l-m}^{(m, m)}(y) \quad (4.4.22)$$

L'expression finale de $H(y)$ est donnée par

$$\begin{aligned} H(y) &= \exp \frac{i}{\hbar} \int \left[\zeta(y) + \frac{\hbar}{2i} \frac{y}{1 - y^2} \right] dy \\ &= \exp \int \left[\frac{S'_n(y)}{S_n(y)} - \frac{(1 + m)y}{1 - y^2} + \frac{y}{2(1 - y^2)} \right] dy \\ &= \lambda (1 - y^2)^{\frac{1+m}{2}} (1 - y^2)^{-\frac{1}{4}} S_n(y) \\ &= \lambda (1 - y^2)^{\frac{1}{4}} (1 - y^2)^{\frac{m}{2}} P_{l-m}^{(m, m)}(y) \end{aligned}$$

avec λ est une constante de normalisation.

D'où :

$$H(\theta) = \lambda \sin^{\frac{1}{2}} \theta \sin^m \theta P_{l-m}^{(m,m)}(\cos \theta) \quad (4.4.23)$$

Ainsi la partie angulaire de la fonction d'onde s'écrit alors comme suit [11]

$$\Theta(\theta, \varphi) = \frac{H(\theta)}{\sqrt{\sin \theta}} e^{im\varphi} = \lambda \sin^m \theta P_{l-m}^{(m,m)}(\cos \theta) e^{im\varphi} = Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (4.4.24)$$

$Y_l^m(\theta, \varphi)$ qui n'est autre que l'harmonique sphérique.

L'expression de l'énergie En reprenant l'expression (4.3.10) et comme $n_\theta = l - m$, on en déduit finalement que

$$E_{n_r, n_\theta} = - \left(\frac{ke^2}{2\hbar(n_r + n_\theta + m + 1)} \right)^2 \quad (4.4.25)$$

ce qui correspond à l'énergie du potentiel coulombien.

Dans ce travail, on s'est intéressé au formalisme de Hamilton-Jacobi quantique et particulièrement à la version développée par Kapoor et al. pour les systèmes quantiques stationnaires et non relativistes. On a construit les solutions exactes pour les états liés pour certains potentiels unidimensionnels et aussi pour le potentiel coulombien tridimensionnel.

A une dimension, on a considéré l'équation de Schrödinger pour un certain potentiel pouvant avoir des états liés. Après une transformation usuelle de la fonction d'onde en termes de la fonction caractéristique quantique, on obtient l'équation de Hamilton-Jacobi quantique. Cette dernière se transforme, en exploitant la relation entre la fonction moment quantique (FMQ) et la fonction caractéristique, en une équation différentielle de type Riccati dite équation de la (FMQ). Celle-ci est l'équation centrale dans ce formalisme. L'idée principale de la technique se résume dans le fait de pouvoir écrire la fonction moment quantique comme une somme d'une fonction analytique et bornée qui peut être prise, en vertu du théorème de Liouville, comme une constante, plus toutes les parties principales des séries de Laurent au voisinage de chaque singularité de la FMQ située dans le plan complexe fini. Aussi, les parties principales relatives aux pôles mobiles, qui correspondent aux nœuds de la fonction d'onde, peuvent être exprimées par le moyen d'un polynôme d'un certain ordre qui coïncide avec le nombre de pôles mobiles. Dans ces conditions, la construction de la fonction moment quantique pour un potentiel donné, permet de retrouver les fonctions d'ondes et aussi de déduire le spectre d'énergie correspondant. Dans ce mémoire, on a pu construire, avec l'aide de cette technique, les solutions exactes de

plusieurs systèmes unidimensionnels tels que : le potentiel de Rosen-Morse, de potentiel de Scarf-I, de Morse et de Poschl-Teller.

L'extension de cette méthode à trois dimensions nous a permis de calculer le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes correspondantes pour le potentiel coulombien. Pour cela, on a construit les fonctions moment quantique angulaire et radial dans le système des coordonnées sphériques, en suivant la même procédure que pour le cas unidimensionnel. Ce qui a permis de remonter aux parties angulaires et radiales des fonctions d'ondes et par conséquent aux niveaux d'énergie du potentiel coulombien.

En somme, la dérivation du spectre d'énergie et des fonctions d'ondes correspondantes, dans le formalisme de Hamilton-Jacobi quantique, est basée essentiellement en la détermination de la structure des singularités de la FMQ dans le plan complexe, c'est-à-dire, la position des pôles fixes et mobiles. C'est ce principal aspect qui donne à cette technique sa simplicité et son efficacité.

Bibliographie

- [1] R. A. Leacock et M. J. Padgett ; Phys. Rev. Lett. 50, 3–6 (1983).
- [2] R. A. Leacock et M. J. Padgett ; Phys. Rev. D 28 2491–2502 (1983).
- [3] R. S. Bhalla et A. K. Kapoor et P. K. Panigrahi ; Am. J. Phys. 65 1187-1194 (1997).
- [4] R. S. Bhalla et A. K. Kapoor et P. K. Panigrahi ; Mod. Phys. Lett. A 12 295-306 (1997).
- [5] S. S. Ranjani, K. G. Geojo, A. K. Kapoor and P. K. Panigrahi ; Mod. Phys. Lett. A. 19, 1457 (2004).
- [6] M. -J. Kim et C. -K. Choi ; J. Korean Phys. Soc. 26 97-100 (1993).
- [7] M. -J. Kim et C. -K. Choi ; Phys. Lett. A 182 184-190 (1993).
- [8] H. Goldstein et C. Poole et J. Safko ; Classical Mechanics 3 édition ; Addison Wesley ; New York(2000)
- [9] K. G. Geojo ; Quantum Hamilton-Jacobi study of wave functions and energy spectrum of solvable quasi-exactly solvable models ; Thèse de Doctorat, Université de Hyderabad (Inde)(2003).
- [10] S. S. Ranjani ; Quantum Hamilton-Jacobi solution for spectra of several one dimensional potebtials with special properties ; Thèse de Doctorat, Université de Hyderabad (Inde)(2004).
- [11] M. Abramowitz and I. A. Stegun ; Handbook of Mathematical Functions ; Dover (1972).