RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE ABBES LAGHROUR KHENCHELA

Faculté des sciences et technologies
Département de Département des sciences des matériaux

Mémoire

Présenté en vue de l'obtention du Diplôme de Master Académique
Filière: Physique de la matière

Thème

Résolution de l'équation de Schrödinger à N-dimensions cas de l'oscillateur harmonique

Présenté par:

ROUMAISSA BOUKHADRA

Devant le jury:

Président :	**K. Boudjemaa**	**Prof**	**Univ. Abbes Laghrour-Khenchela**
Rapporteur :	**H. Moulla**	**Prof**	**Univ. Abbes Laghrour-Khenchela**
Examinateur :	**Z. Hemame**	**Prof**	**Univ. Abbes Laghrour-Khenchela**

Année universitaire : 2019 / 2020

Remerciements :

Toutes les personnes, qui de prés ou de loin par leur coopération

Nous ont facilités la taches et ont contribué

A la mise en forme du thème

Mais avant, nous remercions Dieu tout-puissant qui nous àdonné le

Courage, la volonté ainsi que la patience, pour terminer ce travail.

Nous voulons tut d'abord exprimer notre reconnaissance à

Notre encadreur : MOULA HAFIDA

Pour leur disponibilité, pour ses précieux conseils et ses multiples interventions constructives.

Nous remercions à tous les enseignants et les professeurs du département de sciences de la matière sons exception.

de l'élaboration du présent mémoire, nous nous plions à cette

A l'issue Aimable tradition, qui est de remercier

ROUMAISSA BOUKHADRA

Dédicaces

A l'environnement ;

*À mes très, très chers parents**WASSILA EI SALIM**,MON MARIE ZINOU,*

M0N FILS ASSOUMI source d'amour et d'affection ;

À mes chers frères et MA sœur qui comptent énormément pour moi;

A MA PETITE AMIE PROCHE MARWA ET LES AUTRE PROCHE…

J'espère que je n'ai oublié personne ;

À toutes les personnes qui m'ont soutenu et encouragé tout au long de ces années ٬

Ainsi qu'à tous ceux qui me connaissent à UNIVERSSITE et avec qui j'ai passé

Des années inoubliables ;

À vous tous qui m'aimez ;

Je dédie ce travail.

Liste des symboles

Δ, ∇^2	L'operateur de la place
$\hbar$	Constante de Planck
H	Hamiltonien
E	Energie, valeur propre
V	Energie potentiel
Γ	Fonction gamma d'Euler
E_n	Spectre d'énergie
k	raideur
${}_1\mathrm{F}_1$	Fonction hypergéométrique confluente
$Y_l^m(\theta, \varphi)$	Les harmoniques sphériques
$\delta_{i\ j}$	Kronecker
ψ , φ	Fonction d'onde, Fonction propre

Le sommaire

Table des matières

Introduction ……………………………………………………………………………………a, b
chapitre 01 L'équation de Schrödinger généralisé
1-1-Potentiel central…………………………………………………………….…03
1–2Mouvement dans un potentiel central……………………………….…..03
1-3-L'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques……………..…...05
1-3-1Séparation des variables………………………………………………..07
1-3-2Les harmoniques sphériques ……………………………...…..08
1-3-3Fonctions propres et valeurs propres de $\hat{L}_z$…………………...10
1-3-4Fonctions propres et valeurs propres de L^2…………………..…...11
1-4-L'équation de Schrödinger à N-dimensions……………………………..13
Chapitre 02 Oscillateur harmonique isotrope plus le potentiel quadratique inverse à N-dimensions
2-1-Définition……………………………………………………………………………….…….19
2-2-L'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique isotrope à N-dimensions…………………………………………………………………………………..…….23
2-2-1-Construction de la solution de l'équation de Schrödinger hyper-radiale-25
2-2-2-Solutions de l'équation de Schrödinger hyper-radiale…………………….……30
2-2-2-1-Les valeurs propres ………………………………………………………….………30
2-2-2-2-Les fonctions propres ……………………………………………………………….32
2-3-Les fonctions propres complètes……………………………………………….……32
2-3-1-La dépendance des solutions en N et g…………………………………..………33
2-3-2-Cas particulier (oscillateur harmonique isotrope pur à N-dimension)…. 33
Conclusion…………………………………………………………………………………….35
Bibliographie

Introduction

Introduction

L'étude d'un système physique consiste essentiellement à résoudre son équation de Schrödinger indépendante du temps, En particulier, cette équation aux valeurs propres intervient directement dans les deux types de problèmes les plus fréquents en physique quantique, à savoir:

- La détermination des niveaux d'énergie des états liés; ce sont les valeurs propres du spectre discret de l'Hamiltonien.
- Celle des sections efficaces de collisions: celle-ci se déduisent de la forme asymptotique des fonctions propres relatives aux états non liés.

En mécanique ondulatoire, l'équation de Schrödinger est une équation aux dérivées partielles du second ordre. Pour un système à une dimension, celle-ci se réduit à une équation différentielle. Le problème est en général beaucoup plus difficile lorsque le système possède un plus grand nombre de dimensions. Cependant, les propriétés de symétrie que peut posséder l'Hamiltonien peuvent en faciliter la résolution. Il peut se faire notamment qu'un changement de variable approprié conduise à une équation aux dérivées partielles dont les variables se séparent; le problème de valeur propre se scinde alors en plusieurs problèmes de valeurs propres mettant en jeu un moins grand nombre de dimensions, donc plus simple.

C'est ce qui passe pour une particule dans un potentiel central, c'est à dire dans un potentiel qui ne dépend que de la distance **r** de la particule à un centre de forces et non de la direction du vecteur **r** joignantce centre à la particule. L'Hamiltonien possédent la symétrie sphérique, les variables se séparent complètement lorsqu'on traite le problème en coordonnées polaires; la résolution de l'équation de Schrödinger se réduit, après séparation des variables angulaires, à celle d'une équation différentielle concernant la variable radiale seulement [1].

Ce mémoire comporte deux chapitres. Le premier chapitre est consacré à la résolution de l'équation de Schrödinger d'une particule dans un potentiel central.

L'équation de Schrödinger décrit l'évolution de la fonction d'onde d'une particule. Le besoin de généraliser cette équation à un nombre arbitraire de particules variable a été une des bases de la théorie quantique des champs.

Introduction

La généralisation de l'équation de Schrödinger à N-dimensions est une grande importance dans de multiples domaines de la physique réels est souvent difficile à cause des symétries présentes. Celle-ci obligent les physiciens à adopter des traitements perturbatifs. Le deuxième chapitre est consacré à une application dans l'espace à N-dimensions à savoir, la résolution de l'équation de Schrödinger généralisée pour l'oscillateur harmonique isotope plus le potentiel quadratique inverse. Les résultats obtenus à partir de cette extension sont dépendant de la dimension aussi, les résultats s'accordent avec ceux ou N=2 et N =3.

Chapitre 01

Chapitre 1 : L'équation de Schrödinger généralisé

1-1-Potentiel central

Un potentiel central est un potentiel qui ne dépend que de la distance r de la particule à l'origine des coordonnées. Il intervient dans de nombreux systèmes physiques dont l'un des plus importants est celui d'une particule plongée dans un potentiel Coulombien.

1-2-Mouvement dans un potentiel central

On s'intéresse au problème de la quantification du mouvement d'une particule dans un potentiel central, c'est-à-dire dans un potentiel qui ne dépend que de la distance à un point. L'hamiltonien décrivant un tel système s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}), r = \sqrt{x^2+y^2+z^2} \qquad (1.1)$$

Où En mécanique classique, la solution de ce problème repose sur le fait que le moment cinétique est conservé. En effet, le moment cinétique $\vec{L}$(ou moment de la quantité de mouvement) d'une particule de masse (m) et d'impulsion ($\vec{p}$) située à une distance ($\vec{r}$) de l'origine O d'un référentiel d'inertie défini par [2]

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \vec{r} \wedge \vec{p} \\ \Rightarrow \frac{d\vec{L}}{dt} &= \frac{d\vec{r}}{dt} \wedge \vec{p} + \vec{r} \wedge \frac{d\vec{p}}{dt} \\ &= \frac{\vec{p}}{m} \wedge \vec{p} + \vec{r} \wedge \vec{F} \end{aligned} \qquad (1.2)$$

Mais $\vec{F} = -\vec{\nabla}V$ est dirigée suivant $\vec{r}$ lorsque V ne dépend que de $r \Rightarrow \frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{0} \Rightarrow \vec{L} = \text{constante}$

Les trois composantes L_x, L_y et L_Z du vecteur $\vec{L}$ sont données par

$$\vec{L} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} L_x = yp_z - zp_y \\ L_y = zp_x - xp_z \\ L_z = xp_y - yp_x \end{pmatrix}$$

En mécanique quantique, il en va de même mais le moment cinétique est un opérateur qui s'écrit sous la forme suivante

$$\vec{\hat{L}} = \vec{\hat{r}} \wedge \vec{\hat{p}} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} L_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ L_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ L_y = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

Sachant que :

P: représentant l'operateur impulsion tell que $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$.

ħ: La constante de Planck

$\vec{\boldsymbol{\nabla}}$: L'operateur de dérivés partiels.

Etablissons les règles de commutation entre l'opérateur moment cinétique et l'opérateur position

$$[\hat{L}_x, \hat{x}] = 0 \rightarrow [\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar\varepsilon^{ijk}\hat{x}_k \quad (1.4)$$

On trouve de manière similaire celles avec l'opérateur impulsion

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_x] = 0 \rightarrow [\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\varepsilon^{ijk}\hat{p}_k \quad (1.5)$$

Par ailleurs, l'hamiltonien s'exprime simplement en fonction de $\vec{\hat{L}}$, en effet,

$$\vec{L}_x^2 = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)^2$$

$$= \vec{y}^2\vec{p}^2 + \vec{z}^2\vec{p}^2 + i\hbar\hat{y}\hat{p} + i\hbar\hat{z}\hat{p} - 2\hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_z (1.6)$$

$$\vec{L}^2 = \vec{L}_x^2 + \vec{L}_y^2 + \vec{L}_z^2$$

$$\widehat{\vec{L}}^2 = (\hat{y}^2 + \hat{x}^2)\vec{p}_z^2 + (\hat{y}^2 + \hat{z}^2)\vec{p}_x^2 + (\hat{z}^2 + \hat{x}^2)\vec{p}_y^2 + 2i\hbar(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z) - 2\hat{y}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_z - 2\hat{x}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_y - 2\hat{z}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_x$$

$$\widehat{\vec{L}}^2 = \vec{\hat{r}}\vec{\hat{p}} - (\vec{\hat{r}}.\vec{\hat{p}}) + i\hbar\vec{\hat{r}}.\vec{\hat{p}} (1.7)$$

⇔

$$\widehat{\vec{p}}^2 = \frac{\widehat{\vec{L}^2}}{r^2} - \hbar\frac{\partial^2}{\partial r^2} - 2\frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial}{\partial r} (1.8)$$

⇒

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\widehat{\vec{L}^2}}{2mr^2} + V(r). \quad (1.9)$$

Cette forme d'hamiltomien est très proche de la formulation hamiltomienne du problème classique.

En mécanique classique l'hamiltomien s'écrit :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{\widehat{\vec{L}^2}}{2mr^2} + V(r) \quad (1.10)$$

Comme $\vec{\hat{p}}_r = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2\frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$Alors $\vec{\hat{p}}^2 = \vec{\hat{p}}_r^2 + \frac{\vec{\hat{L}}^2}{r^2}$

l' hamiltomien quantique peut effectivement se mettre sous la forme

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\vec{P_r}}}{2m} + \frac{\widehat{\vec{L^2}}}{2mr^2} + \hat{V}(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\widehat{\vec{L}^2}}{\hbar^2 r^2}\right)\right\} + \hat{V}(r)(1.11)$$

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

1-3-L'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques:

L'évolution des fonctions d'onde est régie par l'équation de Schrödinger, qui joue un rôle équivalent à la relation fondamentale de la dynamique en classique.
En général, l'équation de Schrödinger stationnaire s'écrit sous la forme

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathrm{r}) + \mathrm{V}(\mathrm{r})\Psi(\mathrm{r}) = \mathrm{E}\Psi(\mathrm{r}) \quad (1.12)$$

Où E et Ψ sont respectivement l'énergie et la fonction d'onde de la particule
Pour 1 dimension et en coordonnées cartésiennes

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(\mathrm{x}) + \mathrm{V}(\mathrm{x})\Psi(\mathrm{x}) = \mathrm{E}\Psi(\mathrm{x}) \quad (1.13)$$

Pour 2 dimensions et en coordonnées cartésiennes

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]\Psi(\mathrm{x,y}) + \mathrm{V}(\mathrm{x,y})\Psi(\mathrm{x,y}) = \mathrm{E}\Psi(\mathrm{x,y})(1.14)$$

Pour 3 dimensions et en coordonnées cartésiennes

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\Psi(x,y,z)+V(x,y,z)\Psi(x,y,z)=E\Psi(x,y,z)(1.15)$$

Les coordonnées cartésiennes sont mal adaptées à la résolution de ce problème et les coordonnées sphériques sont le meilleur choix.
Pour convertir l'équation de Schrödinger en coordonnes sphériques, on utilise les suivantes :

$$x = r\sin\theta\cos\varphi$$
$$y = r\sin\theta\sin\varphi$$
$$z = r\cos\theta$$

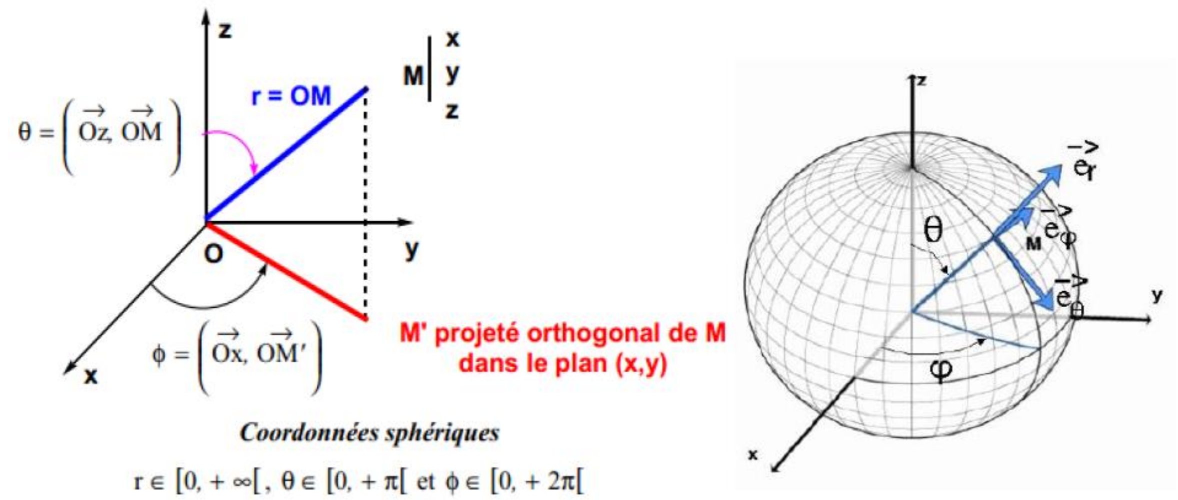


Figure 1 : Définition des coordonnées sphériques

L'opérateur Laplacien Δ S'écrit dans les coordonnées sphérique comme [3]

$$V^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta^2}\frac{\partial}{\partial\theta} \qquad (1.16)$$

Opérateurs $\hat{L}_X, \hat{L}_y$ et $\hat{L}_z$ en coordonnées polaire

$\hat{L}_X, \hat{L}_y$ et $\hat{L}_z$ opérateurs différentiels hemétiques, définis [dans un systéme d'unites où $(\hbar = 1)$] par :

$$\hat{\vec{L}}=\frac{1}{i}\left(\hat{\vec{r}}\wedge\vec{\nabla}\right) \qquad (1.17)$$

En coordonnées polaire :

$$\hat{L}_Z = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = e^{\pm i\varphi}\left[\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\partial\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

Avec L_+ et L_- sont des opérateurs d'échelles.
Sachant que

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\left[\frac{1}{\sin\partial}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\partial\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin\partial^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \qquad (1.18)$$

On obtient l'opérateur du carré du moment cinétique:

$$L^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin\theta^2}\frac{\partial}{\partial\omega}\right\}$$

Donc la relation (1.16), de la norme équivalente:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\widehat{\vec{L}^2}}{\hbar^2 r^2}.$$

Alors on écrit l'équation de Schrödinger en coordonné sphérique comme [4]:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\widehat{L^2}}{\hbar^2 r^2} + V(r)\right]\right\}\Psi(r,\theta,\varphi) = E\Psi(r,\theta,\varphi) \qquad (1.19)$$

D'où

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta^2}\frac{\partial}{\partial\omega}\right]\Psi(r,\theta,\varphi)$$

$$+V(r,\theta,\varphi)\Psi(r,\theta,\varphi) = E\Psi(r,\theta,\varphi) \qquad (1.20)$$

1-3-1 Séparation des variables :

Les trois opérateurs $H, \hat{L}_Z$ et $\hat{L}^2$ commutent, ils ont donc un ensemble commun de fonction propres$\Psi(r,\theta,\varphi)$.
La séparation des variables permet nous d'écrire la fonction d'onde comme [3][5]:

$\Psi(r,\theta,\varphi) = R_l(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$(1.21)

Où

$R_l(r)$ est la partie radiale de la fonction d'onde qui dépend seulement de rayon r.
$Y_l^m(\theta,\varphi)$ représenté la partie angulaire dépend des ongles $\theta\ et\ \varphi$ et appelé aussi des harmoniques sphériques.
l: le nombre quantique orbital est un entier postif ou nul.
M : le nombre quantique magnétique est entier vérifiant les conditions
$-l \leq m \leq l.$

ce qui conduit à deux équation, l'une radiale et l'autre angulaire et qui sont respectivement

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r)+V(r)R(r)=ER(r) \qquad (1.22)$$

$$\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin\theta^2}\frac{\partial}{\partial\varphi}+l(l+1)\right\}Y_l^m(\theta,\varphi)=\mathbf{0} \qquad (1.23)$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\widehat{L^2}}{\hbar^2 r^2}+V(r)\right]\right\}R_l(r)Y_l^m(\theta,\varphi)=ER_l(r)Y_l^m(\theta,\varphi)(1.24)$$

1-3-2 Les harmoniques sphériques :

Les harmoniques sphériques $Y_l^m(\theta,\varphi)$ sont les fonctions propres communes aux observables $\hat{L}_z$ et $\hat{L}^2$

On prend (oz) comme axe polaire, coordonnées polaire de $\hat{\vec{r}}$; $\Omega \equiv (\theta,\varphi)$ désigne l'ensemble des deux coordonnées angulaire $\left(\varphi = 0\ plan\ z0x\ , \theta = \frac{\pi}{2}\ plan\ z0y\right)$. élément d'angle solide :

$$d\Omega = sin\theta d\theta d\varphi. \qquad (1.25)$$

Relation d'ortho-normalisation et de fermeture :

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m^*}(\theta,\varphi)Y_l^{m'}(\theta,\varphi) = \frac{\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi')}{\sin\theta} = \delta(\Omega-\Omega')$$

$$\int Y_l^{m*} Y_l^{m\prime} d\Omega = \int_{\partial}^{2\pi} d\varphi \int_{\partial}^{\pi} \sin\theta d\theta Y_l^{m^*}(\theta,\varphi) Y_l^{m'}(\theta,\varphi) = \delta_{mm'}\delta_{u'} \qquad (1.26)$$

Les Y_l^m forment un système ortho-normal complet de fonctions de carré sommable sur la sphère de rayon 1.

Dans une réflexion d'espace $(\theta, \varphi) \longrightarrow (\pi - \theta, \varphi + \pi)$:

$$Y_l^m(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^{\ell} Y_l^m(\theta, \varphi) \qquad (1.27)$$

Conjugaison complexe

$$Y_l^{m^*}(\theta, \varphi) = (-l)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi) \qquad (1.28)$$

Relation avec les fonctions de Legendre (m≥0).

$$Y_l^{m^*}(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)}\right]^{1/2} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \qquad (1.29)$$

Y_l^mest le produit par $e^{im\varphi} sin^{|m|}\theta$ d'un polynôme de degré $(\ell - |\mathrm{m}|)$et de parité $(-1)^{\ell - m}$en cosθ.en particulier

$$m = 0 \qquad Y_\ell^0 = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell^m(cos\theta),$$

$$m = \ell \qquad y_\ell^m = (-1)^\ell \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(2\ell)!}{2^{2\ell}(\ell!)^2}\right]^{\frac{1}{2}} sin^\ell\theta e^{i\ell\varphi}$$

Polynômes harmoniques et harmoniques sphériques :

Les (2$\boldsymbol{\ell}$+1) polynômes homogènes de degré l'en x, y, z

$$y_l^m(r) = r^l y_l^m(\theta, \varphi) \qquad (1.30)$$

(m= - l , l +1, ..., + l)

Forment une suite de (2 l +1) polynômes harmoniques de degré l linéairement indépendant :

$$\Delta y_l^m(r) = 0 \qquad (1.31)$$

Tableau des premières harmoniques sphériques:

l	m	$y_l^m(\theta,\varphi)$
0	0	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
1 1	0 ± 1	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$ $\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi}$
2 2 2	0 ± 1 ± 2	$\sqrt{\frac{5}{4\pi}}(\frac{3}{2}\cos^2\theta-\frac{1}{2})$ $\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\varphi}$ $\sqrt{\frac{15}{32\pi}\sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}}$

Pour calculer $y_l^m(\theta,\varphi)$ faisons la séparation des variables suivante [5]

$$y_l^m(\theta,\varphi)=T(\theta)\Phi(\varphi) \tag{1.32}$$

1-3-3 Fonctions propres et valeurs propres de $\hat{L}_z$:

Les fonctions propres $\Phi(\varphi)$ dépendent de la seule variableφ et doivent satisfaire à l'équation suivante, où m st un scalaire quelconque.

On a la valeur propre de $\hat{\boldsymbol{L}}_{\boldsymbol{z}}$ est de la forme[6]:

$$\hat{L}_z=m\hbar=-i\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{1.33}$$

Par identifier [5, 6] :

$$-i\frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi}=m\Phi(\varphi) \tag{1.34}$$

On utilise l'intégral d'ont les solutions sont de la forme :

$$\Phi_m(\varphi)=Ae^{im\varphi} \tag{1.35}$$

Où A est la constant de la normalisation $A = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$

1-3-4- Fonctions propres et valeurs propres de L^2 :

Les valeurs propres de $\boldsymbol{L^2}$est de la forme$\hbar^2 l(l+1)$avec $-l \leq m \leq l$.
tel que est l entier $(l = 0,1,2,\ldots)$

Les opérateurs associés à $\boldsymbol{L^2}$ et $\boldsymbol{\hat{L}_z}$ qui commutent, on un ensemble commun de fonctions propres. $\boldsymbol{L^2}$dépend de $\boldsymbol{\theta}$ et $\boldsymbol{\varphi}$, $\boldsymbol{\hat{L}_z}$ dépend de $\boldsymbol{\varphi}$ seul. Les fonctions propres $\Phi(\boldsymbol{\varphi})$ de $\boldsymbol{\hat{L}_z}$ ayant été déterminées, ces solutions communes ne peuvent être que de la forme [5]et [7] :

$$y_l^m(\theta,\varphi) = T(\theta)\Phi_m(\varphi) \tag{1.36}$$

En remplaçant (1.36) dans (1.37) :

$$y_l^m(\theta,\varphi) = T(\theta)\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{im\varphi} \tag{1.37}$$

D'où l'équation aux valeurs propres de $\boldsymbol{L^2}[\mathbf{7}]$

$$-\hbar^2\left\{\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin\theta^2}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}R_l(r)Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)R_l(r)Y_l^m(\theta,\varphi)(1.38)$$

On pose $\lambda = l(l+1)$où l est un entier positif ou nul de valeur à absolue supérieure ou égale à **m**. En d'autre termes $-l \leq m \leq l$ où λ est un scalaire

En remplaçant (1.36) dans (1.38) :

$$\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin\theta^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}T(\theta)\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{im\varphi} = \lambda T(\theta)\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{im\varphi}$$

En développant le premier membre

$$\left\{\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{im\varphi}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}T(\theta)\right)+\frac{1}{\sin\theta^2}T(\theta)\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{im\varphi}\right)\right\}$$

Dans le dernier terme se transforme selon

$$\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\left(e^{im\varphi}\right) = -m^2$$

La fonction ϕ ,déjà connue ,disparaît alors de l'équation une figure plus que T [8]:

$$\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}T(\theta)\right)-m^2\frac{1}{\sin\theta^2}\right\}T(\theta)=\lambda T(\theta) \quad (1.39)$$

On pose $k = m^2$, m étant un entier positif.

Nous reportons cette valeur k dans l'équation que nous modifions en effectuant le changement de variable $= \cos\theta$, la fonction $T(\theta)$ devenant $P(u)$ c'est-à-dire on dérive u :

$$du = -sin\theta d\theta. \quad (1.40)$$

Si nous prenons l'inverse de la 1ère dérivation

$$\frac{d}{du} = -\frac{1}{sin\theta}\frac{d}{d\theta} \quad (1.41)$$

On multiplie l'équation (1.41) par $sin^2\theta,$ on obtient :

$$sin\theta\frac{d}{d\theta} = -sin^2\theta\frac{d}{du} \quad (1.42)$$

Et on a aussi : $sin^2\theta = 1 - u^2$

Donc la relation (1.39) devient de la forme suivante [9]

$$\frac{d}{du}\left[(1-u^2)\frac{dP(u)}{du}\right]+\left(\lambda-\frac{m^2}{1-u^2}\right)P(u)=0 \quad (1.43)$$

Dans le cas général, cette équation différentielle du deuxième ordre a 2 solutions indépendant qui devient infinies pour $m = \pm 1$.

Une des solutions peut être fini pour tout valeur de u:

Pour $m = 0, P(u)$ sera un polynôme de Legendre
Pour $m \neq 0$, une solution toujours finie ne sera possible.
Dans ce dernier cas, la solution sera un polynôme de Legendre associé $P_l^m(u)$

$$P_l^m(u) = (1-u^2)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}}P_l^m(u) \quad (1.44)$$

Les fonctions propres de $\mathbf{L}^2$ s'écrivant alors solution de la partie angulaire de l'équation de Schrödinger sera donc:

$$y_l^m(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}P_l^m(u) = (1-\omega^2)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}}P_l^m(u) \quad (1.45)$$

On peut écrire

$$y_l^m(\theta,\varphi) = N_{lm}P_l^m(cos\theta)e^{im\varphi}$$

où

N_{lm} étant constante de normalisation. Ces fonctions sont appelées harmoniques sphériques.

1-4-L'équation de Schrödinger à N-dimensions:

Considérons le mouvement d'une particule dans un potentiel à symétrie sphérique à N-dimensions.

L'équation de Schrödinger pour ce problème s'écrit (ħ = m =1)

$$\left[\frac{-1}{2}\nabla_{\mathrm{N}}^2(\mathrm{r})\right]\Psi = E\Psi, \tag{1.46}$$

Où r est le vecteur position à N-dimensions ayant les composantes cartésiennes$x_1, x_2, \dots x_N$ et module $\left(\sum_{i=1}^{N} x_i^2\right)^{\frac{1}{2}}$,∇_N^2 est donné par

$$\nabla_N^2 = \sum_{i=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}, \tag{1.47}$$

Et $V_N(r)$ est un potentiel qui dépend seulement de la distance radiale r. A cause de la symétrie sphérique du problème, il est convenable d'introduire les coordonnées hyper-sphériques qui sont définies comme

$$x_1 = r\cos\theta_1 \sin\theta_2 \sin\theta_3 \dots \sin\theta_{N-1},$$

$$x_2 = r\sin\theta_1 \sin\theta_2 \sin\theta_3 \dots \sin\theta_{N-1},$$

$$x_3 = r\cos\theta_2 \sin\theta_3 \sin\theta_4 \dots \sin\theta_{N-1},$$

.. ………………………………………..

$$x_J = r\cos\theta_{j-1} \sin\theta_j \sin\theta_{j+1} \dots \sin\theta_{N-1,}$$

…………………………………………

$$x_{N-1} = r\cos\theta_{N-2} \sin\theta_{N-1,}$$

$$x_N = r\cos\theta_{N=1,} \tag{1.48}$$

Où

$N = 3,4,5, \dots (pour\ N = 2, x_1 = r\cos\theta_1, x_2 = r\sin\theta_1), 0 \le r \le \infty, 0 \le \theta_1 \le 2\pi, 0 \le \theta_j \le \pi, j = 2,3, \dots., N-1$

Le laplacien ∇_N^2 peut être écrit

$$\nabla_N^2 = \frac{1}{h}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial}{\partial\theta_i}\right)\left(\frac{1}{h_i^2}\frac{\partial}{\partial\theta_i}\right), \tag{1.49}$$

Où $\theta_0 \equiv r$. Les $h_i$sont appelés les facteurs d'échelle et son reliés au tenseur métrique fondamentale g_{ii} pour des systèmes de coordonnées orthogonales à travers la relation

$$h_i^2 = g_{ii} = \sum_{k=1}^{N}\left(\frac{\partial x_k}{\partial\theta_i}\right)^2 , \tag{1.50}$$

Et

$$h = \prod_{k=1}^{N-1} h_i \tag{1.51}$$

Par conséquent, l'expression (2.4) s'écrit explicitement

$$\nabla_N^2 = \frac{1}{r^{N-1}}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{N-1}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\sum_{j=1} N-2\ \frac{1}{(\sin\theta_{j+1})^2(\sin\theta_{j+2})(\sin\theta_{N+1})^2} \times \left[\frac{1}{(\sin\theta_j)^{j-1}}\frac{\partial}{\partial\theta_j}(\sin\theta_j)^{j-1}\frac{\partial}{\partial\theta_j}\right] + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{(\sin\theta_{N-1})^{N-2}}\frac{\partial}{\partial\theta_{N-1}}(\sin\theta_{N-1})^{N-2}\frac{\partial}{\partial\theta_{N-1}}\right] \tag{1.52}$$

Avec : $A_N^2(\Omega)$ est l'operateur différentiel partiel

$$A_N^2(\Omega) = \sum_{J=1} N - 2\left[\left(\frac{1}{(\sin\theta_{j+1})^2(\sin\theta_{j+2})^2 \dots (\sin\theta_{N+1})^2}\right)\left(\frac{1}{(\sin\theta_j)^{j-1}}\frac{\partial}{\partial\theta_j}(\sin\theta_j)^{j-1}\frac{\partial}{\partial\theta_j}\right)\right] + \left[\frac{1}{(\sin\theta_{N-1})^{N-2}}\frac{\partial}{\partial\theta_{N-1}}(\sin\theta_{N-1})^{N-2}\frac{\partial}{\partial\theta_{N-1}}\right]$$

Les composantes du moment angulaire sont définies comme des tenseurs antisymétriques

$$L_{ij} = -L_{ji} \quad i = 1,2,3, \dots, j-1, \quad j = 2,3, \dots, N \tag{1.53}$$

Où p_i L'operateur moment conjugué canomique de x_i qui peut être exprimé comme

$$P_k = -i\frac{\partial}{\partial x} = -i\sum_{j=0}^{N-1}\left(\frac{\partial\theta_j}{\partial x_k}\right)\frac{\partial}{\partial\theta_j}$$

$$= -i\sum_{J=0}^{N-1}\left(\frac{1}{h_i^2}\frac{\partial x_k}{\partial\theta_j}\right)\frac{\partial}{\partial\theta_j}, \tag{1.54}$$

Et vérifie les conditions

$$\sum_{i=0}^{N-1}\frac{\partial x_i}{\partial\theta_i}\frac{\partial x_l}{\partial\theta_j} = \delta_{ij}h_i^2, \qquad \sum_{i=0}^{N-1}\frac{\partial\theta_i}{\partial x_k}\frac{\partial x_l}{\partial\theta_i} = \delta_{kl}, \tag{1.55}$$

Qui découlement des équations (2,3) et de la propriété d'orthogonalité du système de coordonnée.

Les composantes du moment angulaire satisfont les relations de commutation

$$[L_{ij}, L_{kl}] = i\delta_{jk}L_{ik} + i\delta_{ik}L_{jl} - i\delta_{jk}L_{il} - i\delta_{il}L_{jk}. \tag{1.56}$$

Les quantités intéressantes représentent les invariants Casimir

$$L_h^2 = \sum ij\, L_{ij}L_{ij}\,,\ i = 1,2, \dots, J = 2,3, \dots\dots, k+1. \tag{1.57}$$

Alors, nous pouvons obtenir

$$L_1^2 = -\frac{\partial^2}{\partial\theta i^2}\,,$$

$$L_2^2 = -\left(\frac{1}{\sin\theta_2}\frac{\partial}{\partial\theta_2}\sin\theta_2\frac{\partial}{\partial\theta_2} - \frac{L_1^2}{\sin^2\theta_2}\right),$$

… … … … … … … … … … …

$$L_k^2 = \left(\frac{1}{\sin^{k-1}\theta_k}\frac{\partial}{\partial\theta_k}\sin^{k-1}\theta_k\frac{\partial}{\partial\theta_k} - \frac{L_{k-1}^2}{\sin^2\theta_k}\right)$$

… … … … … … … … … … … … … … … … … … …

$$L_{N-1}^2 = -\left(\frac{1}{\sin^{N-2}\theta_{N-1}}\frac{\partial}{\partial\theta_{N-1}}\sin^{N-2}\theta_k\frac{\partial}{\partial\theta_{N-1}} - \frac{L_{N-2}^2}{\sin^2\theta_{N-1}}\right) \qquad (1.58)$$

Il est alors facile de montrer que

$$\nabla_N^2 = \frac{1}{r^{N-1}}\frac{\partial}{\partial r}r^{N-1}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L_{N-1}^2}{r^3} \qquad (1.59)$$

Maintenant, les fonctions propres communes aux opérateurs qui commutent $L_1^2, L_2^2, ...$ par $Y_{\lambda_{N-2},\lambda_{N-1},.........\lambda_2,\lambda_1}(\theta_1,\theta_2,\ldots\ldots,\theta_{N-1})$. Nous pouvons écrire

$$L^2 Y_{\lambda_{N-2},\lambda_{N-1},.........\lambda_2,\lambda_1}(\theta_1,\theta_2,\ldots\ldots,\theta_{N-1}) = \lambda_k Y_{\lambda_{N-2},\lambda_{N-1},.........\lambda_2,\lambda_1}(\theta_1,\theta_2,\ldots\ldots,\theta_{N-1}) \qquad (1.60)$$

Où valeurs propresλ_k sont réelles et non négatives et vérifient la condition $\lambda_k \geq \lambda_{k-1.}$ La forme des invariants de Casimir suggèrent que les fonctions propres $Y_{\lambda_{N-2},\lambda_{N-1},.........\lambda_2,\lambda_1}(\theta_1,\theta_2,\ldots\ldots,\theta_{N-1})$ peuvent s'exprime comme

$$Y_{\lambda_{N-2},\lambda_{N-1},.........\lambda_2,\lambda_1}(\theta_1,\theta_2,\ldots\ldots,\theta_{N-1}) = \prod_{k=1}^{N-1}\Theta_{\lambda_{k,}\lambda_{k-1}}(\theta_k), \qquad (1.61)$$

$$\pi_{k=1}^{N-1} \cong Y_{\lambda_k,\lambda_{k-1},=}(\theta_k)$$

Avec :

$$\Theta_{\lambda_{k,}\lambda_{k-1}}(\theta_1) = \Theta_1(\lambda_1)$$

$$L_1^2\Theta_1(\theta_1) = \boldsymbol{\lambda_1}\Theta_1(\boldsymbol{\theta_1}) \text{ ,(1.62)}$$

$$L_k^2(\lambda_{k-1})\Theta_{\lambda_k,\lambda_{k-1}}(\theta_k) = \boldsymbol{\lambda_k}\Theta_{\lambda_k,\lambda_{k-1}}(\theta_k) ,, \; k = 2,3,\ldots\ldots,N-1 \qquad (1.63)$$

Où

$$L_k^2(\lambda_{k-1}) = -(\frac{\partial^2}{\partial\theta_k^2} + (k-1)cot\theta_k\frac{\partial}{\partial\theta_k} - \frac{\lambda_{k-1}}{sin_{\theta_K}^2}) \qquad (1.64)$$

Les équations (2.17) et (2.18) avec k = 2 définissent les harmoniques sphériques à 3 dimensions.

En utilisant les relations précédentes, on peut écrire

$$\boldsymbol{\lambda_1} = \mathrm{l}_1^2, \boldsymbol{\lambda_2} = \mathrm{l}_2(\mathrm{l}_2+1), \mathrm{l}_2 = 0,1,2,\dots, \mathrm{l}_1 = \mathrm{l}_2, \mathrm{l}_2 - 1, \dots, \mathrm{l}_2 + 1, -\mathrm{l}_2 \qquad (1.65)$$

De sorte que pour un l_2 donné, $l_2 = 0,1,2,\dots$,alors $l_1 = l_2, l_2 - 1, \dots, l_2 + 1, -l_2$. A partir de ces expressions, il est clair que l_k est de la forme

$$\boldsymbol{\lambda_k} = l_k(l_k + k - 1) \qquad (1.66)$$

Où l_k est entier

Finalement, nous pouvons écrire

$$L_{N-1}^2 Y_{l_{N-1,N-2}}(\theta_{1,}\theta_2, \dots \theta_{N-1,}) = L_{N-1}(L_{N-1} + N - 2)Y_{l_{N-1,N-2,\dots,j_2 j_1}}(\theta_1, \theta_2, \dots., \theta_{N-1}) \qquad (1.67)$$

Avec

$$L_{N-1} = 0,1,2,\dots; \qquad L_{N-2} = 0,1,2,\dots, L_{N-1}; \qquad L_{N-3} = 0,1,2,\dots, L_{N-2};$$

$$L_3 = 0,1,2,\dots, L_4; \qquad L_2 = 0,1,2,\dots, L_3; \qquad L_1 = -L_2 + 1, \dots, L_2 - 1, L_2.$$

Maintenant en remplaçant

$$\Psi(r, \theta_1, \theta_2, \dots., \theta_{N-1}) = R(r)Y_{l_{N-1,N-2,\dots,j_2 j_1}}(\theta_1, \theta_2, \dots., \theta_{N-1}), \qquad (1.68)$$

dans l'équation (2.1) et utilisant les relations (2.14) et (2.23), nous obtenons la partie radiale de l'équation de Schrödinger

$$\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{N-1}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{l(l+N-2)}{2r^2}V_N(r)\right]R(r) = ER(r) \qquad (1.69)$$

Pour éliminer la première dérivée, nous utilisons la substitution

$$U(r) = r^{\frac{N-2}{2}}R(r) \qquad (1.70)$$

Par conséquent, (2.24) se réduit à

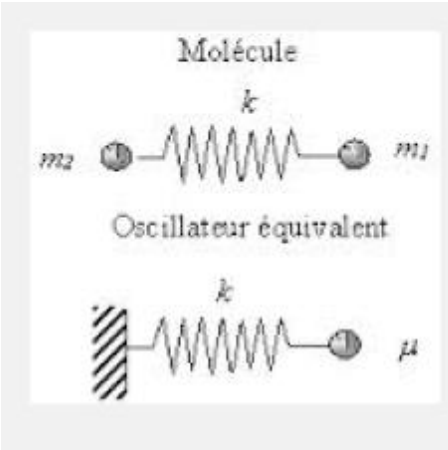
$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{(k-1)(k-3)}{8r^2} + V_N(r)\right]U(r) = EU(r), \qquad k = N + 2l \qquad (1.71)$$

Chapitre 02

Chapitre 02 : Oscillateur harmonique isotrope plus le potentiel quadratique inverse à N-dimensions

2-1-Définition

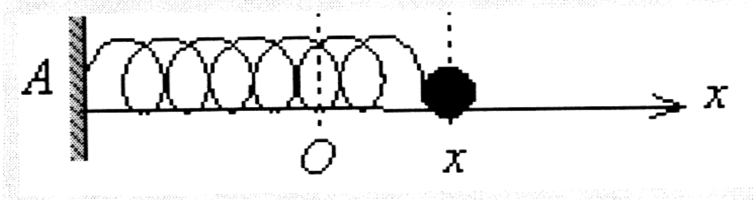
L'oscillateur harmonique joue un rôle important en physique classique ou quantique car il apparait de manière approchée chaque fois qu'un système décrit de petits mouvements autour d'une position d'équilibre.



Un oscillateur harmonique en mécanique classique est un point matériel de masse m, soumis à une force de rappel proportionnelle à la distance qui le sépare de l'origine,
Soit :

$$F = -kx$$

Où **k** est une constante positive.



L'équation du mouvement de la particule sur l'axe Ox s'écrit sous la forme suivante

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + kx = 0 \Leftrightarrow \ddot{x} + \omega^2 x = 0$$

Avec

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \text{ est la pulsation}$$

Et

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}. \quad \text{Est la fréquence d'oscillation.}$$

La solution de cette équation est purement sinusoïdale et s'écrit

$$x = x_0 \cos(\omega t + \theta)$$

Les énergies cinétique et potentielle de la particule valent respectivement

$$T = \frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = \frac{P^2}{2m} = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 sin^2(\omega t - \theta)$$

Et

$$V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 cos^2(\omega t - \theta)$$

de sorte que son énergie totale est

$$E = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2$$

L'énergie *E* de la particule est donc constante. Ainsi si l'on se fixe *K*, les limites $\pm x_o$ du mouvement classique s'obtiennent facilement à partir de l'intersection de la parabole décrivant V(x) avec la droite parallèle à Ox et d'ordonnée *E*.
En ces points l'énergie potentielle est maximale et égale à *E* et l'énergie cinétique est nulle. Le mouvement classique est donc borné et se limite à des oscillations entre les points d'abscisses $-x_0$ et $+ x_0$.

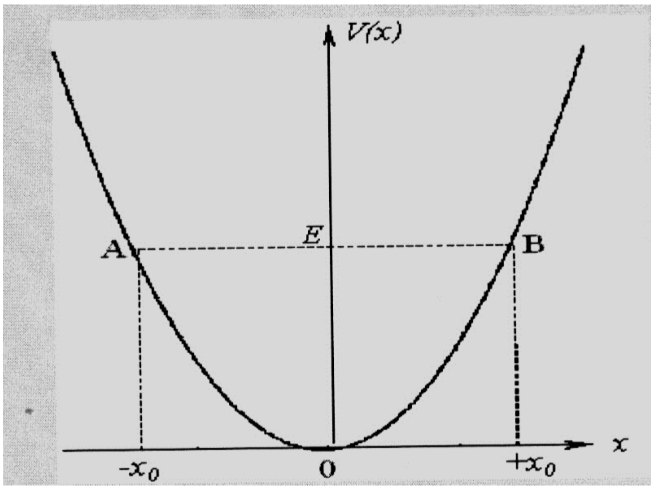


Figure 2 : Energie potentielle d'un oscillateur harmonique à une dimension

Des oscillateurs à une ou plusieurs dimensions jouent un rôle important en physique quantique. Ils permettent de décrire différents phénomènes de vibrations d'atomes auteur d'une position d'équilibre dans une molécule ou dans un réseau cristallin. Ils permettent aussi de décrire, mais de façon plus approximative, les vibrations de la surface d'un noyon atomique ainsi que les mouvements des protons et des neutrons dans ce noyau.

Le modèle le plus simple pouvant représenter la vibration d'une molécule est l'oscillateur harmonique.

un système moléculaire diatomique peut se ramener à ce schéma mécanique mécanique, nous supposons que les deux atomes ne sont plus liés de façons rigide, mais peuvent osciller autour de leurs positions d'équilibre le long de internucléaire.

selon le mécanique quantique, le mouvement de la molécule est décrit par l'équation de Schrödinger qui s'écrit:

$$\frac{d^2\Psi(r)}{dr^2} + \frac{8\pi^2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{1}{2}(r - r_e)^2\right]\Psi(r) = 0,$$

E est l'énergie totale de la molécule et $\Psi(r)$ est la fonctiond'onde, dont le carré du module donne la distance **r.**

r_e est la distance internucléaire à l'équilibre (de vibration), ladistanceréelle des deux atomes au temps t.

L'équation précédente considérée donc la molécule comme un oscillateur harmonique (c'est-à-dire un point matériel oscillant sous l'effet d'une force de rappel proportionnelle à l'élongation) dont la masse est la masse réduite de la molécule.

Il est bien connu que les atomes s'organisent dans les cristaux pour former des structures cristallines bien définies. Si on se place à 0k°, les atomes sont fixes dans leurs positions d'équilibre. Si on augmente la température, les atomes vont vibrer autour de leurs positions d'équilibre. L'énergie d'une vibration est quantifiée et le quantum d'énergie est appelé phonon (par analogie avec les photons).

Pour calculer l'énergie associée aux modes de vibration, il faut faire le traitement quantique du réseau d'oscillateurs harmoniques couplés que constitue le réseau cristallin.

Les valeurs propres de l'hamiltonien du système sont quantifiées de la forme:

$$E_n = \hbar w\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

où n est une entier naturel et ω est la pulsation de du mode considéré.

Dans la théorie des vibrations cristallines, les mouvements du réseau sont représentés par une série d'oscillateurs isotropes à 2 dimensions.

Un oscillateur harmonique isotrope est un oscillateur dont le potentiel ne dépend que de la distance r de la particule à l'origine; le potentiel est par suite invariant dans une rotation quelconque.

Un oscillateur harmonique isotrope à N dimensions est une particule située dans potentiel central proportionnel au carré de la distance au centre.

Son Hamiltonien est

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_i \,, \quad avec\ H_i = \frac{1}{2\mu}\left(p_i^2 + \mu^2 w^2 r_i^2\right)$$

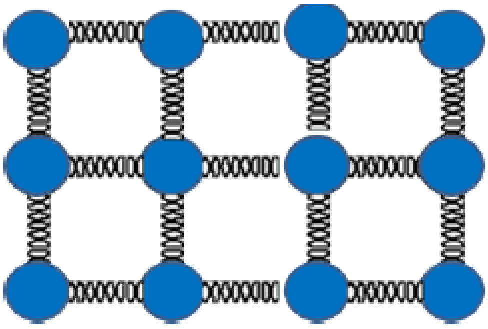


Figure 3 : Réseau cristallin.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'étude de l'oscillateur harmonique isotrope à N-dimensions plus une barrière de potentiel (potentiel quadratique inverse) [11]. Après la construction de l'équation de Schrödinger, nous cherchons ses solutions qui sont les valeurs propres et les fonctions d'onde d'une équation hypergéométrique radiale. Deux cas particuliers sont déduits.

2-2-L'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique isotrope plus le potentiel quadratique inverse à N-dimensions

Considérons le mouvement d'une particule sous l'action d'un potentiel à symétrie sphérique à N dimensions.

L'équation de Schrödinger pour ce problème s'écrit

$$H\Psi = E\Psi \Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\mathrm{N}}^2 + \mathrm{V(r)}\right]\Psi = E\Psi \qquad (2.1)$$

Tel que le potentiel sous traitement est de la forme

$$V(r) = \frac{\mu w^2 r^2}{2} + \frac{g}{r}, \qquad (2.2)$$

Où μ représente la masse réduite et g est une constante.

Alors l'équation de Schrödinger à N-dimension pour l'oscillateur harmonique isotrope devient

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^{N-1}}\frac{\partial}{\partial r}r^{N-1}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{A_N^2(\Omega)}{r^2}\right]\Psi+\left(\frac{\mu w^2r^2}{2}+\frac{g}{r}\right)\Psi=E\Psi \tag{2.3}$$

Comme le potentiel est central, l'état stationnaire de la fonction d'onde $\Psi(r)$ serait de la forme

$$\Psi(r,\theta_1,\theta_2,\ldots.,\theta_{N-1},\varphi)=R(r)Y(r,\theta_1,\theta_2,\ldots.,\theta_{N-1},\varphi)$$

Où R(r) est la fonction d'onde radiale inconnue et $Y(r,\theta_1,\theta_2,\ldots.,\theta_{N-1},\varphi)$ désignent les harmoniques sphériques.

Remplaçons dans l'équation (2.3), nous obtenons

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Bigg\{&Y_l^m(r,\theta_1,\theta_2,\ldots.,\theta_{N-1},\varphi)r^{1-N}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{N-1}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)\\&+R(r)\left[\frac{\Lambda_N^2(\Omega)}{r^2}Y_l^m(r,\theta_1,\theta_2,\ldots.,\theta_{N-1},\varphi)\right]\Bigg\}\\&+\left[\frac{\mu w^2r^2}{2}+\frac{g}{r}-E\right]R(r)Y_l^m(r,\theta_1,\theta_2,\ldots.,\theta_{N-1},\varphi)=0,\end{aligned}$$

divisions cette équation par : $-\frac{\hbar^2}{2\mu}$, multiplions par (r^2) et enfin nous multiplions l'équation par $\frac{1}{R(r)Y_l^m(\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_{N-1},\varphi)}$ nous obtenons l'équation suivante

$$\frac{1}{R(r)}\frac{r^2}{r^{N-1}}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{N-1}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)-\frac{2\mu}{\hbar^2}r^2\left[E-\left(\frac{\mu w^2r^2}{2}+\frac{g}{r^2}\right)\right]=$$
$$-\frac{1}{Y(r,\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_{N-1},\varphi)}\Lambda_N^2Y(r,\theta_1,\theta_2,\ldots.,\theta_{N-1},\varphi),$$

Nous remarquons que les deux membres de cette égalité dépendent de deux variables différentes ; alors ils doivent être égaux à une constante β.

L'équation (2.3) s'écrit alors sous la forme de deux équations différentielles

$$r^{1-N}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{N-1}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)-\frac{\beta}{r^2}R(r)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-\left(\frac{\mu w^2r^2}{2}+\frac{g}{r^2}\right)\right]R(r)=0 \tag{2.4}$$

$$[\Lambda^2+l(l+N-2)]Y_l^m(\theta_1,\theta_2,\ldots.,\theta_{N-1},\varphi)=0 \tag{2.5}$$

Posons

$$\beta = l(l + N - 2)$$

Où l est le nombre quartique orbital avec $l = 1,2,3, \ldots$

β est une constante de séparation dont les valeurs constituent les valeurs propres de l'opérateur de Laplace-Beltrami.

2.2.1construction de la solution de l'équation de Schrödinger hyper –radiale

Nous constatons que l'équation (2.4) possède deux points singuliers 0 et ∞ qui sont respectivement régulier, par conséquent, pour résoudre cette équation, nous examinons d'abord le comportement des solutions R (r) au voisinage de ces singularités.

- nous remarquons que lorsque r tend cers zéro($r \to 0$)le terme (g/r^2) est mal défini alors, nous supposons que le comportement de la fonction d'onde R(r) soit de la forme

$$R(r)\alpha\square r^{\alpha_l} \qquad (2.6)$$

$R'(r) = \alpha_l r^{\alpha_l - 1}$ $\quad et \quad$ $R''(r) = \alpha_l(\alpha_l - 1) r^{\alpha_l - 2}$

En remplaçant (2.6) dans l'équation (2.4), nous obtenons

$$\left[\alpha_1(\alpha_1 - 1) + (N - 1)\alpha_1 + l(l + N - 2) - 2\frac{\mu g}{\hbar^2}\right] r^{\alpha_l - 2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} r^{\lambda} - \frac{\mu^2 w^2 r^{\lambda}}{\hbar^2} = 0,$$

en égalent à zéro le coefficient du terme de la plus basse puissance, nous obtenons

$$\alpha_l(\alpha_l + N - 2) - l(l + N - 2) - 2\frac{\mu g}{\hbar^2} = 0,$$

La résolution de cette équation donne deux valeurs possibles

$$\alpha_l = \frac{N - 2}{2} \pm \sqrt{l(l + N - 2) + 2\frac{\mu g}{\hbar^2}},$$

Il est clair que la valeur positive de $\boldsymbol{\lambda_l}$ est la seule valeur acceptable

$$\alpha_l = \frac{N-2}{2} + \sqrt{l(l+N-2) + 2\frac{\mu g}{\hbar^2}}.$$

- comme l'équation (2.4) admet une singularité à (∞) alors ses solution relatives aux états lies doivent être normalisées et se comportent comme $\exp(-ar^2)$, ces fonctions constituent évidement les solutions de l'équation suivante :

$$R''(r) + \left(2\frac{\mu E}{\hbar^2} + \frac{\mu^2 w^2 r^2}{\hbar^2}\right) R(r) = 0, \tag{2.7}$$

D'où $a = \frac{\mu w}{2\hbar}$

Finalement, il est raisonnable de donner la fonction d'onde R(r) la forme suivante :

$$R(r) = r^{\alpha_l} \exp\left(-\frac{\mu \omega r^2}{2\hbar}\right) F(r). \tag{2.8}$$

Pour déterminer la fonction F(r), nous remplaçons l'expression (2.8) dans (2.4)

Sachant que :

$$R'(r) = \left[\alpha_l r^{\alpha_l - 1} - \frac{\mu\omega}{\hbar} r^{\alpha_l + 1}\right] e^{\left(\frac{-\mu\omega r^2}{2\hbar}\right)} F(r) + r^{\alpha_l} e^{\left(\frac{-\mu\omega r^2}{2\hbar}\right)} F'(r), \tag{2.9}$$

$$\begin{aligned} R''(r) = {} & r^{\alpha_l} e^{\left(\frac{-\mu\omega r^2}{2\hbar}\right)} F''^{(r)} \\ & + \left[\alpha_l r^{\alpha_l - 1} - \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right) r^{\alpha_l + 1} + \alpha_l r^{\alpha_l - 1} - \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right) r^{\alpha_l + 1}\right] e^{\left(\frac{-\mu\omega r^2}{2\hbar}\right)} F'(r) \\ & + \left[\alpha_l(\alpha_l - 1) r^{\alpha_l - 2} - \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right) \alpha_l r^{\alpha_l} - \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)(\alpha_l + 1) r^{\alpha_l} \right. \\ & \left. + \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^2 r^{(\alpha_l + 2)}\right] e^{\left(\frac{-\mu\omega r^2}{2\hbar}\right)} F^{(r)}, \end{aligned} \tag{2.10}$$

Nous obtenons l'équation différentielle suivante

$$F''(r) + \left[\frac{2\alpha_l + N - 1}{r} - \frac{2\mu\omega r}{\hbar}\right] F(r) - \left[\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)(2\alpha_l + N) + K^2\right] F(r) = 0. \tag{2.11}$$

Nous posons $\xi = \frac{\mu\omega r^2}{\hbar}$, alors

$$\frac{\partial\xi}{\partial r} = \frac{2\mu\omega}{\hbar}\left(\frac{\hbar\xi}{\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{2.12}$$

Et :

$$F'(r) = \frac{2\mu\omega}{\hbar}\left(\left(\frac{\hbar\xi}{\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\right)F'(\xi)\ ;\ F''(r) = \frac{4\mu\omega\xi}{\hbar}F''(\xi) + \frac{2\mu\omega}{\hbar}F'(\xi), \tag{2.13}$$

Nous remplaçons les deux résultats (2.12) et (2.13) dans l'équation (2.11), on obtient l'équation suivante :

$$\frac{4\mu\omega\varphi}{\hbar}F''(\xi) + \frac{2\mu\omega}{\hbar}F'(\xi) + \left[\frac{2\alpha_l + N - 1}{\left(\frac{\hbar\xi}{\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}}} - \frac{2\mu\omega}{\hbar}\left(\frac{\hbar\xi}{\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\right]\frac{2\mu\omega}{\hbar}\left(\frac{\hbar\xi}{\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}}F'(\xi)$$
$$+\left[-\frac{\mu\omega}{\hbar}(2\alpha_l + N) + K^2\right]F(\xi) = 0,$$

$$\Rightarrow \frac{4\mu\omega\xi}{\hbar}F''(\xi) + \left[\frac{(2\alpha_l + N)2\mu\omega}{\hbar} - \frac{4\mu\omega\xi}{\hbar}\right]F'(\xi) - \left[\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)(2\alpha_l + N) - K^2\right]$$
$$\times F(\xi) = 0,$$

devisons cette équation par$\frac{4\mu\omega}{\hbar}$, alors

$$\xi F''(\xi) + \left[\frac{(2\alpha_l+N)}{2} - \xi\right]F'(\xi) - \left[\frac{(2\alpha_l+N)}{4} - \frac{\hbar K^2}{4\mu\omega}\right]F(\xi) = 0. \tag{2.14}$$

Il est remarquable que cette équation est une équation de type hypergéométrique confluente général ou l'équation de Kumer[10].

Pour la résolution de cette équation, nous utilisons la méthode de Frobenius.

$$F(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \xi^{k+\varrho}, \tag{2.15}$$

Par définition, C_0 est le premier coefficient non-nul de ce développement ($C_0 \neq 0$). Nous allons construire les coefficients de cette série hypergéométrique .Dans ce but, nous devons trouver la relation de récurrence liant deux coefficients consécutifs :

Calculons$\frac{d}{d\xi}\left(\sum_{K=0}^{\infty} C_K \varphi^{K+\varrho}\right)et\frac{d^2}{d\xi^2}\left(\sum_{K=0}^{\infty} C_K \varphi^{K+\varrho}\right)$ce qui donne

$$\frac{d}{d\xi}\left(\sum_{K=0}^{\infty} C_K \xi^{K+\varrho}\right) = \sum\nolimits_{K=0}^{\infty} C_k\,(K+\varrho)\xi^{K+\varrho-1}$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\left(\sum_{K=0}^{\infty} C_K \xi^{K+\varrho}\right) = \sum\nolimits_{K=0}^{\infty} C_k\,(K+\varrho)(K+\varrho-1)\xi^{K+\varrho-2}$$

Introduisons ces formules dans l'équation (2.14), nous obtenons

$$\sum_{k=0}^{\infty} C_k(k+\varrho)\left[(k+\varrho-1)+\frac{2\alpha_l+N}{2}\right]\xi^{K+\varrho-1} - \sum_{k=0}^{\infty} C_k\left[(k+\varrho)+\left(\frac{2\alpha_l+N}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu\omega}\right)\right]\xi^{K+\varrho} = 0,$$

En rassemblant les termes associés à $\xi^{K+\varrho-1}$

$$\sum\nolimits_{K=0}^{\infty} C_k\,(K+\varrho)\left[(K+\varrho-1)+\frac{2\alpha_l+N}{2}\right]\xi^{K+\varrho-1} - \sum_{K=1}^{\infty} C_{K-1}\left[(K-1+\varrho)+\left(\frac{2\alpha_l+N}{4}-\frac{\hbar\hbar^2}{4\mu\omega}\right)\right]\xi^{K+\varrho-1} = 0,$$

$\Rightarrow$

$$C_0\varrho\left[\varrho-1+\left(\frac{2\alpha_l+N}{2}\right)\xi^{\varrho-1}\right] + \sum\nolimits_{K=1}^{\infty}\left[C_k(k+\varrho)\left(k+\varrho-1+\frac{(2\alpha_l+N)}{2}\right) - C_{k-1}\left(k-1+\varrho+\frac{(2\alpha_l+N)}{2}-\frac{\hbar k^2}{4\mu\omega}\right)\right]\xi^{k+\varrho-1} = 0 \qquad (2.16)$$

le terme de plus bas degré est en$\xi^{\varrho-1}$, alors nous pouvons écrire

$$C_0\varrho\left[\varrho - 1 + \frac{(2\alpha_l+N)}{2}\right] = 0, \tag{2.17}$$

ϱ prend les valeurs possibles suivantes

$$\varrho = 0 \tag{2.18}$$

et

$$\varrho = 1 - \left(\frac{2\alpha_l+N}{2}\right), \tag{2.19}$$

Posons ensuite le coefficient du terme général $\xi^{k+\varrho-1}$ égal à zéro, nous obtenons la relation de récurrence suivante

$$C_K = \left[\frac{\left(k+\varrho-1+\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu\omega}\right)}{(k+\varrho)\left(k+\varrho-1+\frac{(2\alpha_l+N)}{2}\right)}\right] C_{k-1}. \tag{2.20}$$

Pour ϱ=0, l'équation (2.20) devient

$$C_k = \left[\frac{\left(k-1+\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu\omega}\right)}{k\left(k-1+\frac{(2\alpha_l+N)}{2}\right)}\right] C_{k-1}. \tag{2.21}$$

Choisissons C_0=1, et après un calcul simple, nous déduisons l'expression suivante

$$C_n = \frac{\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu\omega}\right)_{n-1}}{n!\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{2}\right)_{n-1}}, \tag{2.22}$$

où nous avons utilisé la notation

$$\begin{Bmatrix} (\lambda)_n = \lambda(\lambda+1)(\lambda+2)\ldots\ldots..(\lambda+n-1) \\ (\lambda)_0 = 1 \end{Bmatrix}$$

Finalement, la fonction F(ξ) peut s'écrire sous la forme

$$F(\xi) = 1 + \frac{\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu w}\right)}{\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{2}\right)}\xi + \frac{\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu w}+1\right)}{2\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{2}\right)+1}\xi^2 + \cdots$$

$$+\frac{\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu\omega}\right)\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu\omega}+1\right)\dots\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu\omega}+n-1\right)}{1\times 2\times 3\dots\times n\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{2}\right)\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{2}+1\right)\dots\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{2}+n-1\right)}\xi^{n},$$

$$F(\xi)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu\omega}\right)_n}{n!\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{2}\right)_n}\xi^n \tag{2.23}$$

$\Rightarrow$

$$F(\xi)={}_1F_1\left[\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu\omega},\frac{(2\alpha_l+N)}{2};\xi\right]. \tag{2.24}$$

En remplaçant dans l'équation (2.8), la fonction d'onde de notre système prend la forme suivante

$$\mathrm{R(r)}=r^{\alpha_l}\exp\left(-\frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}\right){}_1F_1\left[\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu\omega},\frac{(2\alpha_l+N)}{2};\frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}\right]. \tag{2.25}$$

2-2-2 solution de l'équation de Schrödinger hyper-radiale

2-2-2-1 les valeurs propres

Nous remarquons que la fonction hyper- radiale (2.25) présente pour les grandes valeurs de r un comportement non acceptable physiquement, pour les grandes valeurs de r, la série confluent **$_1F_1$** est proportionnelle à $exp\left(-\frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}\right)$ suivant la formule

$$\left[{}_1F_1\left(\alpha,\gamma,\frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}\right)=\exp\left(-\frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}\right){}_1F_1\left(\gamma-\alpha,\gamma,-\frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}\right)\right],$$

ce qui rend la fonction d'onde hyper radiale R(r) divergente, pour qu'elle soit normalisée, nous somme dans l'obligation de tronquer cette série et dans ce cas ${}_1F_1$ devient un polynôme et la fonction d'onde R(r) ⟶0 pour r⟶∞

$$ {}_1F_1\left[\left(\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu w}\right),\frac{(2\alpha_l+N)}{2},\frac{\mu w r^2}{\hbar}\right]= $$

$$ 1+\frac{\Gamma\left[\frac{(2\alpha_l+N)}{4}\right]}{\Gamma\left[\frac{(2\alpha_l+N)}{2}-\frac{\hbar k^2}{4\mu w}\right]}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\Gamma\left[\frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu w}+n\right]}{n!\,\Gamma\left[\frac{(2\alpha_l+N)}{2}\right]}\left(\frac{\mu w}{\hbar}\right), $$

il s'en suit

$$ \frac{(2\alpha_l+N)}{4}-\frac{\hbar k^2}{4\mu\omega}=-n_r,\qquad n_r=0,1,2,\dots $$

ou encore

$$ \frac{\hbar k^2}{4\mu\omega}=n_r+\frac{(2\alpha_l+N)}{4}. \tag{2.26} $$

Maintenant, nous remplaçons $k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2}$ dans l'expression (2.26), nous obtenons

$$ \frac{\hbar}{4\mu w}\frac{2\mu E}{\hbar^2}=n_r+\frac{(2\alpha_l+N)}{4} $$

$$ E=\hbar w\left(\alpha_l+\frac{N}{2}+2n_r\right)=\hbar w\left(n+\frac{N}{2}\right), \tag{2.27} $$

où

$$ \alpha=\alpha_l=\frac{N-2}{2}+\sqrt{l(l+N-2)+\frac{2\mu g}{\hbar^2}}, $$

Finalement, les énergies propres du système sont données par l'expression suivante:

$$E = \hbar w\left(2n_r + N - 1 + \sqrt{l(l+N-2) + \frac{2\mu g}{\hbar^2}}\right). \tag{2.28}$$

2-2-2- les Fonctions propres:

Dans ce paragraphe, nous nous occupons de la normalisation des fonctions d'onde hyper-radiale.

La fonction d'onde non normalisée s'écrit

$$R_{n_r,l}(r) = C_{n_r,l}\, r^{\alpha_l} e^{\left(-\frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}\right)} {}_1F_1\left[-n_r, \frac{(2\alpha_l+N)}{2}; \frac{\mu\omega r^2}{\hbar}\right]. \tag{2.29}$$

Où $C_{n_r,l}$ est la constante de normalisation

Finalement la fonction $\mathbf{R_{n_r,l}(r)}$ prend l'expression suivante

$$R_{n_r,l} = \left[\frac{2\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{(2\alpha_l+N)}{2}} n_r!}{\Gamma\left(\alpha_l+\frac{N}{2}+n_r\right)}\right] r^{\alpha_l} e^{\left(-\frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}\right)} L^{\left(\alpha_l+\frac{N-2}{2}\right)}{}_{n_r}\left(\frac{\mu\omega r^2}{\hbar}\right) \tag{2.30}$$

2-3- Les fonctions propres complètes

Les fonctions propres complètes orthonormées relatives à l'oscillateur harmonique isotope à N-dimensions plus le potentiel quadratique inverse s'écrit

$$\varphi(r,\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_{N-2}.\varphi) = \sum_{n_r,l,m} C_{n_r,l} R_{n_r,l} Y_l^m(r,\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_{N-2}.\varphi). \tag{2.31}$$

Avec

$C_{n_r,l}$ et $R_{n_r l}(r)$ sont données par les équations (30) $Y_l^m(r,\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_{N-2}.\varphi)$ sont des extensions multidimensionnelles des harmoniques sphériques familiers appelés les harmoniques hypersphériques du degré l sur la sphère S^{N-1}.

2-3-1 la dépendance des solutions en N et g:

Pour illustrer ce formalisme sur un cas bien connu de l'oscillateur harmonique, on considère le cas où N=2 et g≠0 (g>0), l'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique isotope bidimensionnel plus le potentiel quadratique inverse est:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2}{\partial \varrho^2}+\frac{1}{\varrho}\frac{\partial}{\partial \varrho}+\frac{1}{\varrho^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right]\Psi(\varrho,\varphi)+\left[\frac{\mu\omega^2\varrho}{2}+\frac{g}{\varrho^2}\right]\Psi(\varrho,\varphi)=E\Psi(\varrho,\varphi) \tag{2.32}$$

Supposons que la fonction d'onde admet la forme suivante:

$$\Psi(\varrho,\varphi)=P(\varrho)Y_l^m(\varphi). \tag{2.33}$$

les valeurs propres sont

$$E_{n_\omega}=\hbar\omega\left[\mu_\lambda+2n_\varrho+1\right]. \tag{2.34}$$

et les fonctions propres correspondantes sont

$$\varphi(\varrho,\varphi)=C_{n_\varrho,\lambda}\varrho^{\mu_\lambda}e^{\left(\frac{-\mu\omega\varrho^2}{2\hbar}\right)}Y_l^m(\varphi)\,{}_1F_1\left(-n_\varrho,\mu_\lambda+1,\frac{\mu\omega\varrho^2}{2\hbar}\right) \tag{2.35}$$

avec la constante de normalisation

$$C_{n_\varrho,\lambda}=\left[\frac{2\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\mu_\lambda+1}n_\varrho!}{\Gamma(\mu_\lambda+n_\varrho+1)}\right]^{\frac{1}{2}}\frac{(n_\varrho+\mu_\lambda)!}{n_\varrho!\,\mu_\lambda!}$$

Ces résultats s'accordent avec ceux de la littérature.

2-3-2-Cas particulier: Oscillateur harmonique isotope pur à N-dimension

Pour N arbitraire et g=0, le problème se réduit à l'oscillateur harmonique isotope à N-dimension avec les énergies propres

$$E_{n_r}=\hbar\omega\left[\alpha_l+2n_r+\frac{N}{2}\right], \tag{2.36}$$

et les fonctions propres

$$\Psi_{n_r,l,m}(r,\theta_1,\theta_2,\ldots.,\theta_{N-2}.\varphi) = C_{nr}r^{\alpha l}e^{\left(\frac{-\mu\omega r^2}{2\hbar}\right)}{}_1F_1\left(-n_r,\frac{2\alpha_l+N}{2};\frac{\mu\omega r^2}{\hbar}\right)Y_l^m(r,\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_{N-2}.\varphi), \tag{2.37}$$

avec

$$C_{n_r,l} = \left[\frac{2\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{2\alpha_l+N}2n_r!}{\Gamma\left(n_r+\alpha_l+\frac{N}{2}\right)}\right]^{\frac{1}{2}}\frac{\left(n_r+\alpha_l+\frac{N-2}{2}\right)!}{n_r!\left(\alpha_l+\frac{N-2}{2}\right)!}.$$

Est la constante de normalisation.

Ces résultats correspondent aux résultats obtenus pour l'oscillateur harmonique isotope pure à N dimensions.

Conclusion

Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons étudié le problème de l'oscillateur harmonique isotope plus le potentiel quadratique inverse à N dimension via la résolution de l'équation de Schrödinger, nous avons montré que les résultats obtenus notamment les valeurs de l'énergie ainsi que les fonctions d'ondes correspondantes dépendent de la dimension de l'espace, il est montré aussi que ces résultats se réduisent exactement aux résultats bien connus pour $N=2$ et $g\neq 0$, N arbitraire et $g=0$.

Bibliographie

Bibliographie

[1] A. Messiah« mécanique quantique », Tome 1 (Dunod, Paris 1995)

[2]F.Mila « physique quantique I et II » (EPFL, Avril 2010).

[3] E. Karthe user, Eléments de mécanique quantique, Tome 2, cours à département physique l'université de Liège.

[3] Prof. Minh Quang TRAN, Cours Physique générale IV, 2009,

https://crppwww.epfl.ch/phsgen4/

[4] Claude Aslangul, Mécanique quantique_ Tome2,Développements et applications à basse énergie ,De Boeck Supérieur(2008)

[5] Prof. MinhQuangTRAN,CourshysiquegénéraleIV,2009, https://crppwww.epfl.ch/phsgen4/

[06] .J.Mulders,QuantumMechanics,Lecturesgivenintheacademicyear2005-2006

[7] PatrickChaquin,Coursd'atomique,liaisonchimiqueetspectroscopie,université

[8] B. pierre etcurie.http:// www.lct.jussieu.fr/pagesperso/Chaquin Cagnac ,Physique atomique ,tome1.Expériences et principes fondamentaux, Dunod université

[9] Claude ASLANGUL ,Applications de la Mécanique Quantique ,université pierre et curie,2005-2006.

[10] Z.X.Wang and D.R.Guo""special function"", world scientific (Singapore, 1989).

[11] K.J.Oyew umiand E.A.Bangu du, the Arabian Journal for science and Engineering, volume 28, number 2A.

Résumé :

Dans ce travail, nous avons écrit l'équation de Schrödinger généralise et sa solution dans le cas de l'osculateur harmonique isotrope plus le potentiel quadratique inverse.

Mots clés : osculateur harmonique isotrope, potentiel quadratique inverse, potentiel central, équation de Schrödinger.

Abstrat :

In this work, we have written the generalized Schrödinger equation and its solution for the isotropic harmonic osculation plus the inverse quadratic potential.

Key word: isotropic harmonic oscillator, inverse quadratic potential, central potential, Schrödinger equation.

ملخص:

في هذه المذكرة قمنا بكتابة معادلة Schrödinger المعممة وحلها في حالة هزاز توافقي متماثل المناحي مضافا إليه مربع جهد معكوس .

الكلمات المفتاحية :

هزاز توافقي متماثل المناحي ، مربع جهد معكوس ، معادلة Schrödinger .