



Université Mohamed Khider de Biskra
Faculté des sciences exactes et des sciences de la nature et la vie
Department des sciences de la matière

MÉMOIRE DE MASTER

Domaine des sciences de la matière
Filière : physique
Spécialité : physique énergétique et énergie renouvelable

Réf. : Entrez la référence du document

Présenté et soutenu par :
DJELLAB Abdelatif

Le : mardi 25 juin 2019

Traitement non relativiste de certains potentiels non-centraux

Jury :

Dr. HEDDAR Mebarek	MAA	Université Med Khider Biskra	Rapporteur
Dr. FALEK Mokhtar	MCA	Université Med Khider Biskra	Président
Dr. BAAZOUZI Mourad	MCB	Université Med Khider Biskra	Examineur

Année universitaire : 2018 - 2019

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail à :

*A mes parents .Aucun hommage ne pourrait être à la hauteur de
L'amour Dont ils ne cessent de me combler. Que dieu leur procure*

Bonne santé et longue vie.

*A celui que j'aime beaucoup et qui m'a soutenue tout au long de
Ce projet : ma belle femme **ASMA**, et bien sur A mes frères*

BELGACEM, LAKHDAR, MOHAMED

*A mes sœurs **DJANATTE, NACIRA, KARIMA, SANA,***

A toute ma famille, et mes amis,

Et à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin pour que ce

Projet soit possible, je vous dis merci.

ABDELATIF

Remerciement

On remercie dieu le tout puissant de nous avoir donné la santé et la volonté d'entamer et de terminer ce mémoire.

*Tout d'abord, ce travail ne serait pas aussi riche et n'aurait pas pu avoir le jour sans l'aide et l'encadrement de Mr : **HEDDAR Mebarek**, on le remercie pour la qualité de son encadrement exceptionnel, pour sa patience, sa rigueur et sa disponibilité durant notre préparation de ce mémoire.*

Notre remerciement s'adresse également à tous nos professeurs

Dr. FALEK Mokhtar et Dr. BAAZOUZI Mourad

pour leurs générosités et la grande patience dont ils ont su faire preuve malgré leurs charges académiques et professionnelles.

Nos profonds remerciements vont également à toutes les personnes qui nous ont aidés et soutenu de près ou de loin

Table des matières

Dédicaces

Remerciements

Table Des Matières

Liste Des Tableaux

Liste Des Figures

Nomenclature

Introduction Générale..... 1

Chapitre I : Introduction à l'équation de Schrödinger et les potentiels non-centraux

I-1 Introduction..... 2

I-2 Équation de Schrödinger..... 2

I-3 L'équation de Schrödinger stationnaire..... 2

I-4 Les potentiels non-centraux..... 6

I-4-1 Exemples pour des potentiels non centraux..... 6

Chapitre II : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de kratzer a deux démentions

II-1 Introduction..... 9

II-2 Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel colombien a deux démentions..... 9

II-3 Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de kratzer a deux démentions..... 18

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

III-1 Introduction..... 26

III-2 L'équation aux coordonnées polaires.....

III-3 La solution de la partie angulaire 31

III-4 La solution de la partie radiale 33

III-5 La solution générale.....

Conclusion Générale..... 43

Références

LISTE DES TABLEAUX

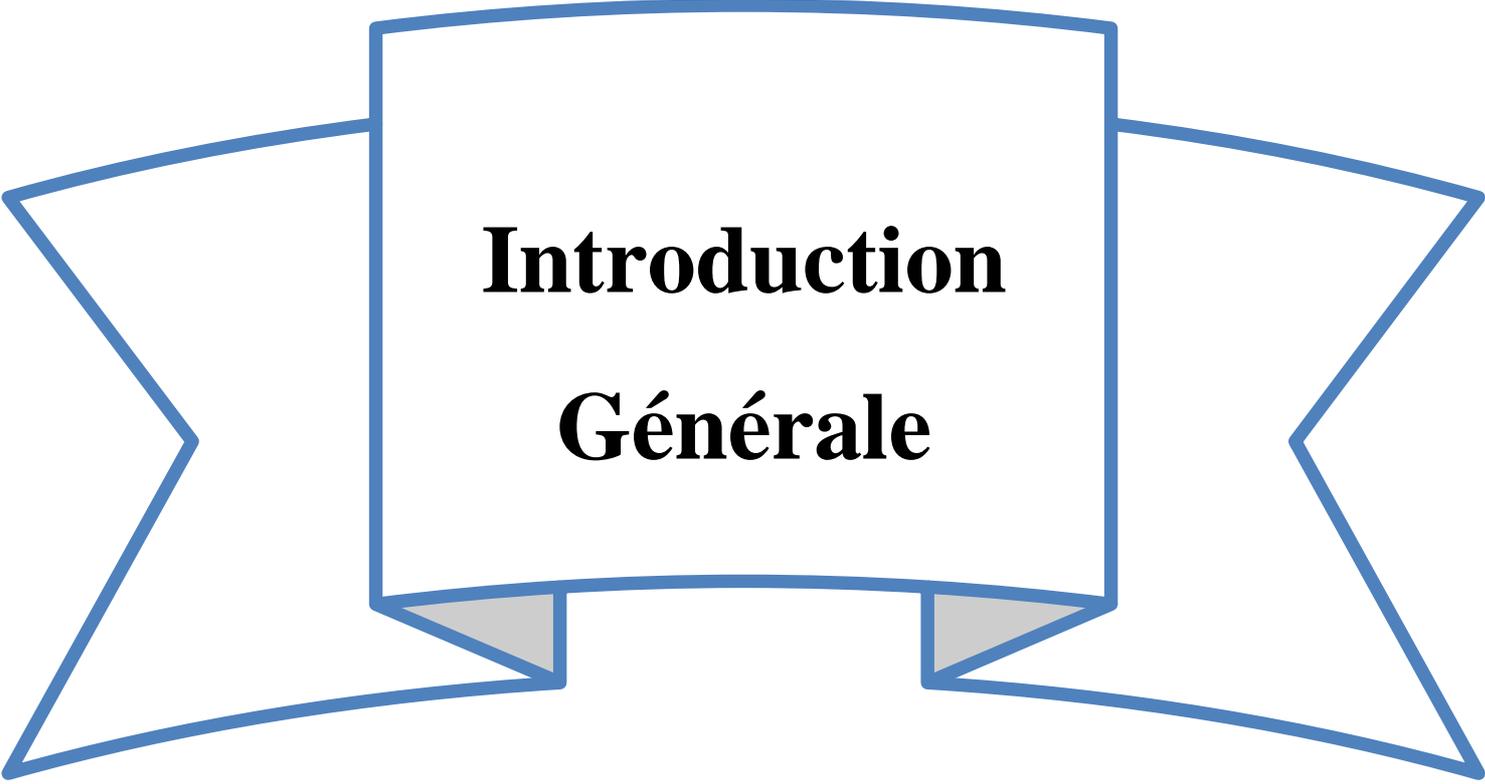
Tableau III.1	Les valeurs critiques de $D_{\theta_{criti}}^{(m)}$ pour certaines valeurs de m .	40
Tableau III.2	Les valeurs critiques de $D_{\theta_{criti}}^{(1)}$ pour certaines valeurs de ($m = 0, D_{\theta} = 0, D_{\theta} = -D_r, D_{\theta} = D_r$).	41

LISTE DES FIGURES

Figure II.2.1	Charge ponctuelle en coordonnées polaires	10
Figure II.3.1	Représentation du potentiel de kratzer.	19
Figure III.2.1	La configuration du dipôle électrique en 2D avec $d \ll r$.	28
Figure III.3.1	$E_{\theta}^{2m}(D_{\theta})$ pour $m=0, 1, 2, 3, 4$ de bas en haut (en a.u.).	40
Figure III.3.2	$E_{n,1}$ pour $m = 0, 1, 2, 3, 4$ de bas en haut (en a.u.).	40
Figure III.3.3	$E_{\theta}^0(D_{\theta})$ pour ($m = 0, D_{\theta} = 0, D_{\theta} = -D_r, D_{\theta} = D_r$) de bas en haut (en a.u.).	41
Figure III.3.4	$E_{\theta}^2(D_{\theta})$ pour ($m = 1, D_{\theta} = 0, D_{\theta} = -D_r, D_{\theta} = D_r$) de bas en haut (en a.u.).	42
Figure III.3.5	$E_{1,1}(D_{\theta})$ pour ($n = 1, m = 1, D_{\theta} = 0, D_{\theta} = -D_r, D_{\theta} = D_r$) de bas en haut (en a.u.).	42
Figure III.3.6	$E_{n,2}(D_{\theta})$ pour ($n = 2, 3, 4, 5$) de bas en haut (en a.u.).	43

NOMENCLATURE

Symbole	Désignation
$\Psi(\vec{r}, t)$	La fonction d'onde dépend de l'espace et du temps.
$P(\vec{r}, t)$	La densité de probabilité de trouver la particule à l'endroit à l'instant t .
\hbar	La constante de Planck.
H	L'opérateur Hamiltonien associé à l'énergie E du system considéré.
E_c	L'énergie cinétique.
$V(r)$	L'énergie potentielle.
Δ	Le Laplacien de la fonction Ψ .
$\Psi(r, \theta, \varphi)$	La fonction d'onde stationnaire.
$R(r)$	La fonction radiale.
$Y(\theta, \varphi)$	Les harmoniques sphériques.
L	Désigne le moment cinétique orbital.
q_e^2	La charge d'électron.
$\Phi(\theta)$	La fonction angulaire.
ℓ	Nombre quantique azimutal (Moment angulaire orbital de l'électron) $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$
n	Nombre quantique principal (Niveau d'énergie de l'électron dans l'atome) $n = 1, 2, 3, 4, \dots$
m_ℓ	Nombre quantique magnétique (Projection du moment angulaire orbital sur un axe) $m_\ell = -\ell, \dots, 0, \dots, \ell$.
${}_1F_1(-n, (\mu + 1), Z)$	La fonction confluyente hypergéométrique.
$L_n^u(z)$	Le polynôme de Laguerre.
D_r	Le moment dipolaire de la grappe et il est désigné par l'indice r .
D_θ	Le moment dipolaire est proportionnel à la distance entre les deux centres de charge et l'angle θ définit l'orientation de la position \vec{r} .
$ce_{2m}(z)$	La fonction de cosinus-elliptique.
$se_{2m+2}(z)$	La fonction de sinus-elliptique.
$a_{2m}(p)$ et $b_{2m}(p)$	Les valeurs caractéristiques de Mathieu.
$E_\theta^{(2m)}$	Les valeurs propres angulaires.
$P_m(p)$ et $P_m(D_\theta)$	des polynômes qui sont écrits en termes de même des pouvoirs de p et D_θ à partir de 2.



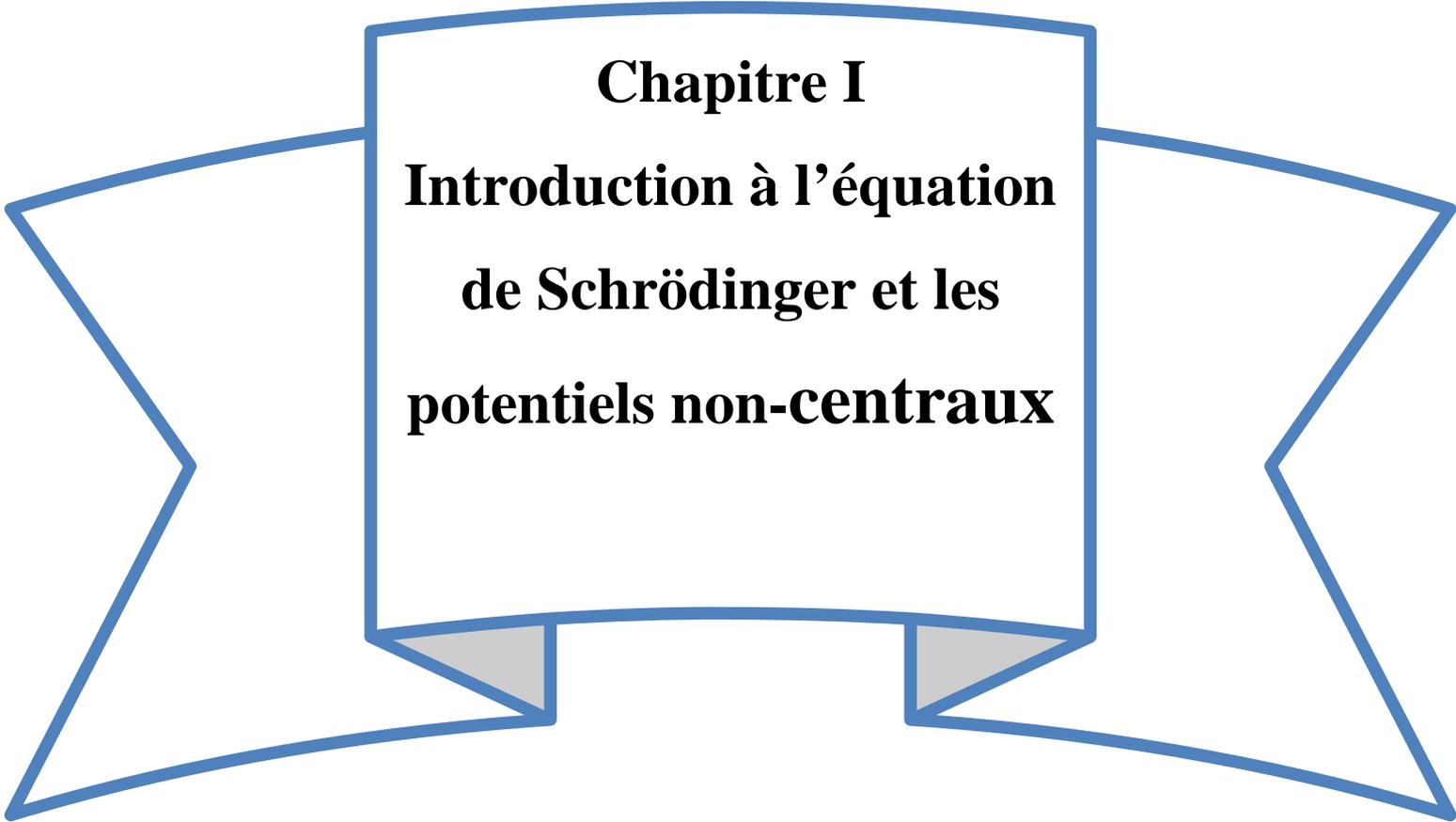
Introduction
Générale

Introduction Générale

La mécanique quantique est la description du comportement de la matière dans tous leurs détails en particulier de tout ce qui se passe à l'échelle atomique. Les phénomènes sont décrits par la fonction d'onde qui contient toutes les informations sur les particules d'un système et ses comportements suit l'équation de Schrödinger [14,15]. Cette équation a été proposée par Erwin Schrödinger en 1926 peu de temps après l'invention par Heisenberg de la mécanique des matrices.

L'étude quantique d'un système physique est basée sur la résolution de l'équation de Schrödinger associée à ce système. Cette résolution ne peut se faire exactement que dans des cas très particuliers où l'Hamiltonien est suffisamment simple pour être facilement diagonalisable. Dans le cas général, l'équation de Schrödinger est trop compliquée qu'on puisse trouver les solutions sous formes analytiques. Dans ce cas, on utilise des méthodes approximatives qui sont nombreuses en physique quantique [16]. Ces méthodes d'approximations permettent d'obtenir analytiquement des solutions approchées, plus ou moins proches des solutions vraies selon la qualité des approximations et des calculs. Plusieurs schémas approximatifs se sont apparus ces dernières années pour calculer le spectre d'énergie de l'équation de Schrödinger pour de nombreuses fonctions potentielles.

Le but de ce travail est de résoudre l'équation de Schrödinger dans l'espace euclidien 2D pour un nouveau potentiel non central composé d'un terme de Kratzer et d'un terme dipolaire, dans le cas de systèmes 2D nous utilisant la séparation de variables et les équations de Mathieu pour la partie angulaire. On va d'abord rappeler, au premier chapitre l'équation de Schrödinger stationnaire dans un potentiel central avec une brève explication pour les potentiels non-centraux. Dans le deuxième chapitre, on va étudier la solution exacte de l'équation de Schrödinger qui décrit la dynamique d'un électron dans un potentiel de coulombien dans la première partie et ensuite un potentiel de Kratzer dans la deuxième partie à 2D, pour déterminer la solution radiale et le spectre énergétique correspondant. Au troisième chapitre on va ajouter à le potentiel de chapitre précédent un potentiel ionique dipolaire (ou dipôle non pur), et ensuite résoudre l'équation de Schrödinger dans ce cas, afin de calculer la fonction d'onde exacte et le spectre énergétique correspondant, ensuite une discussion pour la dépendance des énergies aux paramètres D_r et D_θ . Et enfin une conclusion qui clôture ce travail.



Chapitre I

**Introduction à l'équation
de Schrödinger et les
potentiels non-centraux**

Chapitre I : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de kratzer a deux démentions

I.1 Introduction

En physique quantique la particule est décrite par une fonction d'onde $\Psi(r, t)$ qui est donnée par l'équation de Schrödinger Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles du premier ordre par rapport au temps et de second ordre par rapport aux coordonnées de l'espace [1], Il a été formulé à la fin de 1925 et publié au début de 1926 par le physicien autrichien Erwin Schrödinger [2]. Dans ce travail, nous nous limitons à l'étude des notions de l'équation de Schrödinger stationnaire dans un potentiel central et ensuite une brève explication pour les potentiels non-centraux qui peuvent nous aider dans les chapitres qui vont suivre.

I.2 Équation de Schrödinger

Nous avons vu qu'une particule quantique, qu'elle soit une particule dans une expérience de fentes d'Young ou un électron dans l'atome, est toujours décrite par une fonction d'onde. En général cette fonction d'onde dépend de l'espace et du temps,

$$\Psi(\vec{r}, t). \quad (\text{I.2.1})$$

La densité de probabilité de trouver la particule à l'endroit à l'instant t est :

$$P(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (\text{I.2.2})$$

Lorsque cette densité de probabilité ne dépend pas du temps, on dit que le système est dans un état "stationnaire" [3].

I.3 Équation de Schrödinger stationnaire

L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la physique quantique, comme la loi de Newton en physique classique [4]. Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles qui décrit l'évolution au cours du temps de la fonction d'onde d'un système physique [5], en générale l'équation de Schrödinger d'un système quantique est donnée par [6] :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H\Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.3.1})$$

Où \hbar est la constante de Planck, H est l'opérateur Hamiltonien associé à l'énergie E du system considéré qui est définit par la somme des opérateurs d'énergie cinétique E_c et l'énergie potentielle V :

$$H(\vec{r}, t) = E_c + V(\vec{r}, t) \quad (\text{I.3.2})$$

On note ici que l'opérateur Hamiltonien dépend donc du temps si les potentiels qui entrent en jeu dépendent eux-mêmes explicitement du temps et lorsque l'opérateur (H) ne

Chapitre I : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de kratzer a deux démentions

dépend pas du temps, on est ramené par séparation des variables spatiales et temporelle à une équation aux valeurs propres, appelée équation de Schrödinger stationnaire. Par contre si l'Hamiltonien est en fonction du temps, on est obligé de résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps. C'est le cas par exemple lorsqu'on traite certains problèmes de manière semi-classique ou quand on étudie l'effet sur un atome ou une molécule d'un champ électrique extérieur variable. Il est également parfois intéressant de résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps même si les potentiels ne dépendent pas du temps. On peut citer entre autres les problèmes de calcul de coefficients de transmission au travers de barrières de potentiel [7].

Donc pour définir la fonction d'onde $\Psi(r)$ d'une particule mobile dans un champ à symétrie sphérique $V(r)$, on doit résoudre l'équation de Schrödinger [5] :

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]\Psi = 0 \quad (\text{I.3.3})$$

Où m est la masse de la particule, et $V(r)$ l'énergie potentielle, avec Δ est connu comme le Laplacien de la fonction Ψ .

Le laplacien Δ dans les coordonnées cartésiennes à trois dimensions s'écrit sous la forme [9] :

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{I.3.4})$$

Dans le cas des systèmes conservatifs l'Hamiltonien H ne dépend pas explicitement du temps, et la solution Ψ qui représente un état dynamique d'énergie bien déterminée E .

$$\Psi = \Psi_0 e^{-iEt/\hbar} \quad (\text{I.3.4})$$

Où Ψ_0 est l'amplitude. Ψ dépend des coordonnées de l'espace de configuration mais ne dépend pas du temps. Substituant l'équation (1.7) dans (1.3) nous obtenons :

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{I.3.4})$$

H étant l'opérateur différentiel :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \quad (\text{I.3.5})$$

Dont l'énergie potentielle $V(r)$ ne dépend pas du temps.

Puisque le potentiel V dans l'équation de Schrödinger (I.3.3) est central, c-à-d qu'il ne dépend que de la longueur du vecteur \vec{r} et non de son orientation, ceci suggère qu'on peut représenter le laplacien Δ en coordonnées sphérique à la place des coordonnées cartésiennes.

Chapitre I : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de kratzer a deux démentions

Le calcul de Δ en coordonnées sphérique s'effectue en utilisant les expressions usuelles des coordonnées cartésiennes:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad (\text{I.3.6})$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi \quad (\text{I.3.7})$$

$$z = r \cos \theta \quad (\text{I.3.8})$$

Avec $0 \leq r < \infty, 0 \leq \theta \leq \pi$ et $0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

Donc l'expression de la place en coordonnées sphérique s'écrit comme :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (\text{I.3.9})$$

Finalement l'expression de Schrödinger stationnaire devient comme:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (\text{I.3.10})$$

On note ici que le premier terme dépend seulement de r , ce qui nous donne un certain espoir selon une approche basée sur la séparation des variables pour résoudre le problème en question.

A la lumière de cette approche, comme une première étape, on écrit la fonction d'onde $\Psi(r, \theta, \varphi)$ comme un produit de deux fonctions :

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (\text{I.3.11})$$

Par une substitution dans l'équation (I.3.9), on aura:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V(r) \right] R(r)Y(\theta, \varphi) = ER(r)Y(\theta, \varphi) \quad (\text{I.3.12})$$

En divisant par $R(r)Y(\theta, \varphi)$, on obtient (après multiplication par r^2):

$$\left[\frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) R(r) + \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) \right] = -\frac{1}{Y(\theta, \varphi) \sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] Y(\theta, \varphi) = cst \quad (\text{I.3.13})$$

On remarque ici que :

Le membre de gauche dépend seulement de la composante radiale (r).

Le membre de droite dépend seulement des composantes angulaires θ et φ .

Pour des raisons physiques (quantiques), nous écrivons la constante de séparation C sous la forme $C=l(l+1)$. Ceci nous mène directement au système des équations différentielles suivant :

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) R(r) + \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) R(r) = l(l+1) R(r) \quad (\text{I.3.14})$$

Chapitre I : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de kratzer a deux démentions

Et :

$$-\frac{1}{\sin\theta} \left[\frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] Y(\theta, \varphi) = l(l+1)Y(\theta, \varphi) \quad (\text{I.3.15})$$

Avec (I.3.14) : est appelée l'équation radiale et (I.3.15) : est appelée l'équation angulaire.

D'après les expressions (I.3.14) et (I.3.15), la solution de l'équation radiale dépend évidemment du choix de $V(r)$, mais l'équation angulaire est universelle et valide pour tout potentiel central.

En mécanique quantique, dans l'équation de Schrödinger radiale qui décrit le mouvement d'une particule non relativiste plongée dans un potentiel central $V(r)$.

Mathématiquement, l'expression de Laplacien coordonnées sphériques s'écrit comme :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{r^2 \hbar^2} \quad (\text{I.3.16})$$

Où, nous avons utilisé l'expression suivante :

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \quad (\text{I.3.17})$$

Avec L : désigne le moment cinétique orbital.

A cet égard, il est connue que les fonctions propres de L^2 sont des fonctions appelée les harmoniques sphériques $Y_l^m(\theta, \varphi)$, ayant pour valeurs propres $\hbar^2 l(l+1)$ avec $l=1,2,\dots$ et m varie entre $-l \leq m \leq +l$. On a donc :

$$L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (\text{I.3.18})$$

Ainsi l'équation de Schrödinger devient comme :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi) \quad (\text{I.3.19})$$

On voit que :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} + V(r) \quad (\text{I.3.20})$$

Ne dépend que de variable r seulement, et donc l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} + V(r) \right] R_{n,l}(r) = ER_{n,l}(r) \quad (\text{I.3.21})$$

Maintenant, si nous posons $S_{n,l} = rR_{n,l}(r)$ La fonction $S_{n,l}$ vérifie alors l'équation différentielle :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} + V(r) \right] S_{n,l}(r) = ES_{n,l}(r) \quad (\text{I.3.22})$$

Chapitre I : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de kratzer a deux démentions

On remarque ici que cette équation a la forme que pour un système unidimensionnel sauf qu'à l'énergie potentielle $V(r)$ s'ajoute le terme $\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2}$ que l'on peut appeler terme de force centrifuge et qui s'annule pour $l = 0$.

I.4 les potentiels non-centraux

Dans le cas ou la particule se déplace dans un potentiel non central, c'est mieux d'utiliser le système de coordonnées sphériques (trois dimensions) pour résoudre l'équation de Schrödinger.

Une question pertinente a été posée d'une façon naturelle : qu'est ce qu'un potentiel non central ? Pour répondre à cette question il faut définir le potentiel central. En bref, le potentiel central $V(r)$ est un potentiel qui ne dépend que de la distance r à l'origine des coordonnées. Par conséquent cette définition nous permet de dire que le potentiel non central est une fonction qui dépend du rayon r , de l'angle polaire θ , de l'angle azimutal φ à 3D. La dépendance du potentiel non central $V(r, \theta, \varphi)$ en trois variables nous a conduit d'étudier l'équation de Schrödinger en coordonnées sphérique pour donner au lecteur au moins une idée sur ce qui viendra dans la suite de ce chapitre introductif. Dans ce système nous avons établi la forme générale de l'Hamiltonien pour une particule de masse m et d'impulsion p en mouvement dans un potentiel de type non central $V(r, \theta, \varphi)$, et indépendant du temps, donc l'Hamiltonien s'écrit sous la forme :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r, \theta, \varphi) \quad (\text{I.4.1})$$

I.4.1 Exemples pour des potentiels non centraux

Il existe différentes types des potentiels non centraux dans la littérature qu'ils ont été étudiés en utilisant la méthode de séparation de variable. Parmi lesquels on peut citer quelques potentiels :

➤ **Le potentiel de Makarov :**

Le potentiel de Makarov est l'un des problèmes pouvant être résolus analytiquement en mécanique quantique et peut être utilisé pour décrire des molécules comme le benzène et des interactions entre des paires de noyaux sous-formés. En coordonnées sphériques, le potentiel de Makarov est défini comme [9] :

$$V(r, \theta) = -\frac{a}{r} + \frac{b}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{c \cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \quad (\text{I.4.2})$$

Chapitre I : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de kratzer a deux démentions

➤ Le potentiel de Hartmann :

Le potentiel de Hartmann est l'un de ces problèmes parfaitement solubles. Le potentiel de Hartmann est le potentiel de Coulomb entouré d'un potentiel carré inverse en forme d'anneau. Hartmann avait envisagé à l'origine, en 1972, d'étudier le potentiel des molécules en forme d'anneau. En coordonnées sphériques, le potentiel Hartmann est défini par [10] :

$$V(r, \theta) = V_0 \left(\frac{2r_0}{r} - \frac{r_0^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right) \quad (\text{I.4.3})$$

Où le minimum du puits potentiel V_0 , et la distance radiale r_0 .

➤ Le potentiel de Hautot :

$$V(r, \theta) = V(r) + \frac{f(\theta)}{r^2} \quad (\text{I.4.4})$$

Avec $f(\theta)$ peut avoir au moins trois expressions différentes en fonction de θ à trois dimensions, et de sept expressions si elle est en deux dimensions.

➤ Le potentiel de kratzer en forme de double anneau :

Les potentiels de type Kratzer ont joué un rôle important dans l'histoire de la chimie moléculaire et quantique et ont été jusqu'à présent largement utilisés pour décrire la structure et les interactions moléculaires. En raison de son importance dans le domaine de la physique moléculaire, le potentiel de Kratzer a fait l'objet de nombreuses études depuis son introduction par Kratzer en 1920. Les énergies de vibration centrale k et les énergies de vibration non centrales v des états moléculaires diatomiques jouent un rôle important dans l'étude des états et des structures de vibration des systèmes diatomiques [11].

En coordonnées sphériques, le nouveau potentiel proposé de type Kratzer en forme d'anneau double, qui décrit le mouvement de rotation non-central des molécules, est défini comme suit [11] :

$$V(r, \theta) = -2D_e \left(\frac{r_e}{r} - \frac{1}{2} \frac{r_e^2}{r^2} \right) + \frac{b}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{a}{r^2 \cos^2 \theta} \quad (\text{I.4.5})$$

Où D_e est l'énergie de dissociation, r_e est la séparation internucléaire à l'équilibre, et a et b sont les paramètres sans dimension, respectivement.

➤ le potentiel oscillatoire pseudo-harmonique en forme d'anneau :

Les potentiels moléculaires en forme d'anneau sont des potentiels non centraux, composés de potentiels d'oscillateur harmonique sphériques et d'autres potentiels supplémentaires. De telles fonctions potentielles peuvent être utilisées pour décrire un modèle moléculaire en forme d'anneau (comme le benzène moléculaire) et l'interaction entre le noyau déformé. Ils sont largement utilisés en chimie quantique et en physique

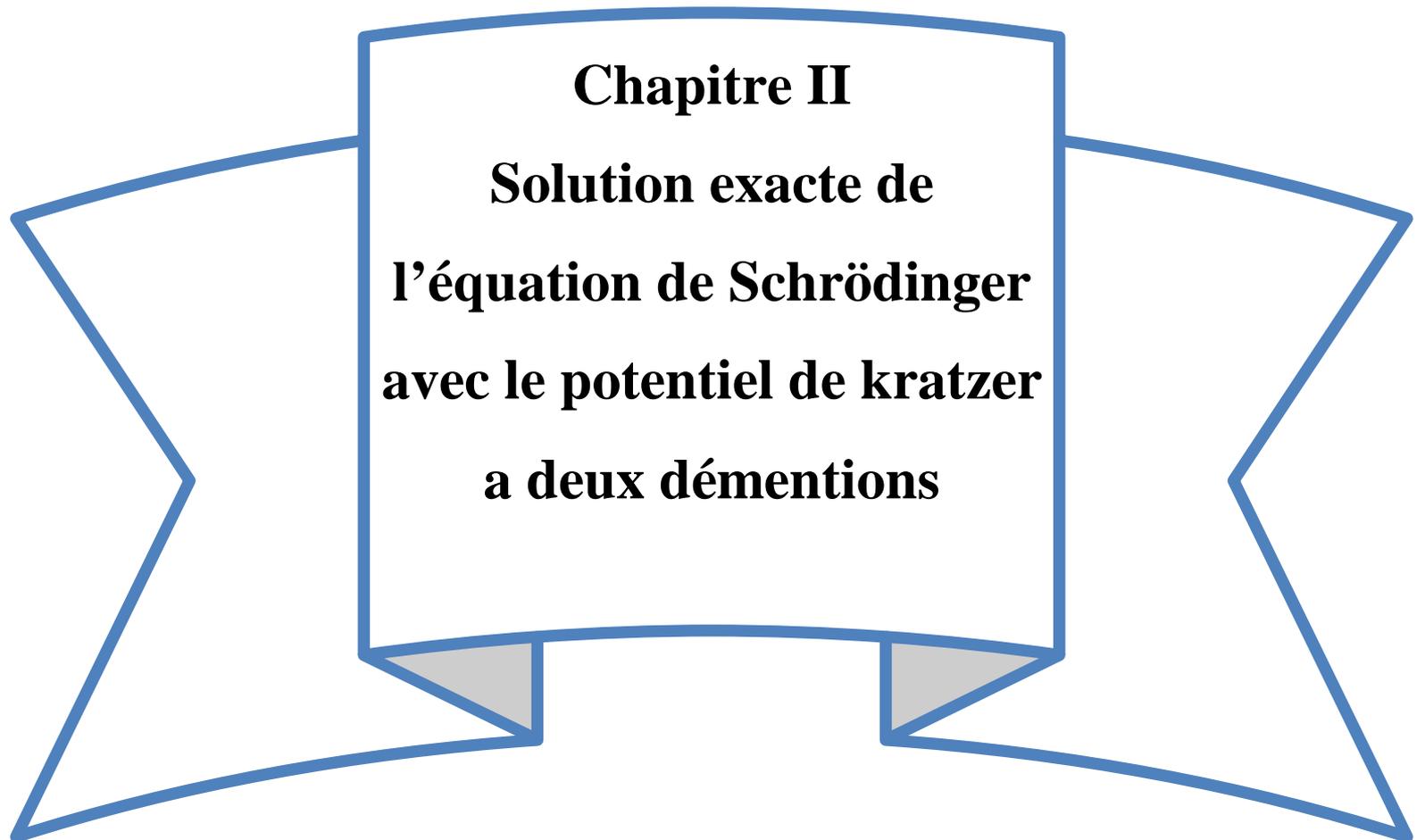
Chapitre I : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de kratzer a deux démentions

nucléaire. Ces dernières années, l'effet relativiste des microparticules dans les champs potentiels de l'oscillateur harmonique non sphérique a suscité un vif intérêt en physique et des résultats significatifs ont été obtenus. Son potentiel est composé de la superposition entre le potentiel de l'oscillateur harmonique et des potentiels de fonction de puissance négatifs, puis de quatre fonctions potentielles, plus deux termes de potentiels non centraux. Son expression est [12] :

$$V(r, \theta) = \frac{K}{2}r^2 + \frac{A}{r^2} + \frac{b}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{c \cos^2 \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \quad (\text{I.4.6})$$

Où K, A, b, c est des paramètres réels sans dimension.

Il y a aussi beaucoup de potentiels non central. Pour ceux intéressés dans ce domaine, nous leur rappelons certains d'entre eux : potentiel d'oscillateur non sphérique en forme d'anneau, le potentiel radial de Killingbeck plus potentiel non central, potentiel d'écharpe trigonométrique et potentiel trigonométrique de Poschl-Teller, harmonique annulaire non sphérique et potentiel de Coulomb améliorés, Yukava potentiel dépendant de l'angle, nouveau potentiel dépendant de l'angle introduit par Berkdemir et Zhang et Huang-Fu, potentiel non central dépendant du temps, potentiel de Smorodinsky-Winternitz modifié, Oscillateur harmonique à double anneau, etc [13].



Chapitre II
Solution exacte de
l'équation de Schrödinger
avec le potentiel de kratzer
a deux démentions

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

II-1 Introduction

En mécanique quantique, le potentiel central de type Kratzer que nous considérons dans ce travail joue un rôle important dans la description des atomes des métaux alcalins quelconques, composé de (Z) électrons. On peut alors affirmer que $(Z-1)$ électrons constituent une structure stable d'un gaz noble (par exemple, les deux premiers électrons du Lithium forment la couche de l'hélium). Où l'électron optique (le dernier électron étant faiblement lié au noyau de l'atome) est protégé du noyau par l'effet d'écran des autres $(Z-1)$ électrons, c'est-à-dire que le champ dans lequel il se meut est créé par un système beaucoup plus complexe de charge l'échelle microscopique, tels que la physique atomique et moléculaire et la chimie quantique [7]. Dans ce travail, on va étudier la solution exacte de l'équation de Schrödinger qui décrit la dynamique d'un électron dans un potentiel de coulombien dans la première partie et ensuite un potentiel de kratzer dans la deuxième partie à 2D, pour déterminer la solution radiale et le spectre énergétique correspondant.

II-2 Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel coulombien à deux dimensions :

L'atome d'hydrogène est le nom qui est donné au système composé d'un électron de masse m et charge $-e$, et un noyau chargé positivement (Ze) situé à l'origine du système de coordonnées. La force centrale entre l'électron et le noyau est déterminée par la fonction de potentiel de Coulomb attractive [17].

$$V(r) = -\frac{ze^2}{r} \quad (\text{II.2.1})$$

L'atome d'hydrogène dans un système tridimensionnel a joué un rôle central dans la formulation et le développement de la mécanique quantique et fait maintenant partie du programme standard de physique de premier cycle moderne. Si le mouvement circulaire de l'électron autour du noyau n'est pas une orbite sphérique comme un satellite autour de la Terre, alors ce système est appelé l'atome d'hydrogène bidimensionnel. Nous aimerions souligner que "2D" dans le nom "atome d'hydrogène 2D" souligne seulement que le mouvement de l'électron de l'atome d'hydrogène est en mouvement incessant autour du noyau chargé positivement. Ce système n'est pas 2D dans un sens strict que tous les champs, y compris les champs électromagnétiques, émission de photons, moment angulaire, et spin ne sont pas confinés à un avion [17].

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

Les états propres d'un atome d'hydrogène 2D sont décrits par l'équation de Schrödinger en coordonnées polaires [17].

Dans cette partie, nous essayons d'étudier le potentiel central de type coulombien à deux dimensions à travers la résolution exacte de l'équation de Schrödinger (indépendante de temps) à 2D:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V(r) \right] \Psi(r) = E\Psi(r) \quad (\text{II.2.1})$$

Où Le potentiel entre le proton et l'électron est donné par le potentiel coulombien :

$$V(r) = -\frac{ze^2}{r} \quad (\text{II.2.2})$$

Avec : $e^2 = q_e^2 k = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0}$

Et q_e^2 : est la charge d'électron.

Le laplacien Δ dans les coordonnées cartésiennes s'écrit sous la forme [8] :

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (\text{II.2.3})$$

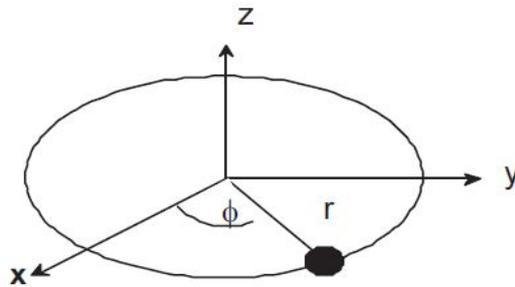


Figure II.2.1 Charge ponctuelle en coordonnées polaires

En raison de la forme du potentiel et puisque nous travaillons avec un système 2D, nous pouvons traiter ce problème en symétrie polaire pour laquelle l'opérateur Δ s'écrit [9]:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad (\text{II.2.4})$$

Avec : $0 \leq r < \infty$ et $0 \leq \theta \leq 2\pi$.

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

Ainsi nous écrivons l'équation d'onde comme suit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + V(r) \right] \Psi(r, \theta) = E\Psi(r, \theta) \quad (\text{II.2.5})$$

En divisant cette équation par $\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\right)$, nous obtenons :

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) - \frac{2m_e}{\hbar^2} V(r) \right] \Psi(r, \theta) = -\frac{2m_e}{\hbar^2} E\Psi(r, \theta) \quad (\text{II.2.6})$$

Et ensuite, on multiplie l'équation (II.2.6) par (r^2) , nous obtenons donc :

$$\left[\left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) - \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 V(r) \right] \Psi(r, \theta) = -\frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 E\Psi(r, \theta) \quad (\text{II.2.7})$$

On remarque que les opérateurs comportent soit la coordonnée r , soient la coordonnée θ , mais elles ne sont pas mélangées. À partir de ce constat, on peut écrire une solution du type [18]:

$$\Psi(r, \theta) = R(r)\Phi(\theta)$$

Dans ce cas, l'équation devient comme :

$$\left[\left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) - \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 V(r) \right] R(r)\Phi(\theta) = -\frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 E R(r)\Phi(\theta) \quad (\text{II.2.8})$$

Ou bien sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \left(r^2 \Phi(\theta) \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + r \Phi(\theta) \frac{\partial R(r)}{\partial r} + R(r) \frac{\partial^2 \Phi(\theta)}{\partial \theta^2} \right) - \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 V(r) R(r)\Phi(\theta) \\ = -\frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 E R(r)\Phi(\theta) \end{aligned} \quad (\text{II.2.9})$$

En divisant cette équation par $(R(r)\Phi(\theta))$ nous obtenons :

$$\left[\frac{1}{R(r)} \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + r \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) + \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) \right] = -\frac{1}{\Phi(\theta)} \frac{\partial^2 \Phi(\theta)}{\partial \theta^2} = cst \quad (\text{II.2.10})$$

En effet, la partie de gauche ne dépend que de r , et la partie droite que de θ , donc le tout est constant, puisque cette équation doit être valable quelques soient r, θ . On obtient ainsi deux équations, une radiale et une angulaire. En fait l'équation angulaire représente une équation aux valeurs propres.

A solution de la partie angulaire:

$$-\frac{1}{\Phi(\theta)} \frac{\partial^2 \Phi(\theta)}{\partial \theta^2} = m_l^2 \quad (\text{II.2.11})$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

Alors :

$$\frac{\partial^2 \Phi(\theta)}{\partial \theta^2} + m_l^2 \Phi(\theta) = 0 \quad (\text{II.2.12})$$

La solution de l'équation est de la forme suivant [18] :

$$\Phi(\theta) = A e^{im_l \theta} \quad (\text{II.2.13})$$

Où A est une constante à déterminer par normalisation, qui peut être déterminé par la condition de normalisation suivante [18] :

$$\int_0^{2\pi} \Phi(\theta) \Phi(\theta)^* d\theta = 1 \Rightarrow \int_0^{2\pi} A e^{im_l \theta} A e^{-im_l \theta} d\theta = 1 \Rightarrow A^2 \int_0^{2\pi} d\theta = 1 \Rightarrow$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Rightarrow \Phi(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \theta} ; m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots \quad (\text{II.2.14})$$

B solution de la partie radial :

On a :

$$\left[\frac{1}{R(r)} \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + r \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) + \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) \right] = m_l^2 \quad (\text{II.2.15})$$

Qui peut réécrit comme :

$$\left[\frac{1}{R(r)} \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + r \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) + \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) \right] = m_l^2 \quad (\text{II.2.16})$$

En divisant cette équation par r^2 et multiplie par $R(r)$, nous obtenons :

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) \right] R(r) = \frac{m_l^2}{r^2} R(r) \quad (\text{II.2.17})$$

$$\Rightarrow \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m_l^2}{r^2} + \frac{2m_e ze^2}{\hbar^2 r} + \frac{2m_e E}{\hbar^2} \right] R(r) = 0 \quad (\text{II.2.18})$$

Ou bien simplifié comme :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m_l^2}{r^2} + \frac{2m_e ze^2}{\hbar^2 r} + \frac{2m_e E}{\hbar^2} \right] R(r) = 0 \quad (\text{II.2.19})$$

Afin de résoudre cette équation, nous utilisons le changement de variable suivant :

$$\rho = \frac{r}{a} ; a = \frac{\hbar^2}{zm_e e^2} ; K = \sqrt{-\frac{2\hbar^2 E}{mz^2 e^4}} \quad (\text{II.2.20})$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

L'équation (II.2.15) se transforme à :

$$\left[\frac{1}{a^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{a^2 \rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m_l^2}{a^2 \rho^2} + \frac{2m_e z e^2}{\hbar^2 a \rho} + \frac{2m_e E}{\hbar^2} \right] R(\rho) = 0 \quad (\text{II.2.21})$$

Et ensuite, on multiplie l'équation (II.2.21) par (a^2) , nous obtenons donc :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m_l^2}{\rho^2} + \frac{2m_e a z e^2}{\hbar^2 \rho} + \frac{2m_e a^2 E}{\hbar^2} \right] R(\rho) = 0 \quad (\text{II.2.22})$$

Que peut écrivons cette équation a la forme suivante :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m_l^2}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - K^2 \right] R(\rho) = 0 \quad (\text{II.2.23})$$

Maintenant, pour arriver à une équation différentielle connue, on utilise la transformation suivante:

$$R(\rho) = \rho^\lambda e^{-\beta \rho} f(\rho) \quad (\text{II.2.24})$$

Où λ, β des constantes qui déterminés à plus tard.

Avec la première et la deuxième dérivée comme suit :

$$\frac{dR(\rho)}{d\rho} = \rho^\lambda e^{-\beta \rho} \left[\frac{df(\rho)}{d\rho} + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \beta \right) f(\rho) \right] \quad (\text{II.2.25})$$

Et :

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} = \rho^\lambda e^{-\beta \rho} \left[\frac{d^2 f(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{2\lambda}{\rho} - 2\beta \right) \frac{df(\rho)}{d\rho} + \left(\frac{\lambda}{\rho^2} (\lambda - 1) - \frac{2\lambda\beta}{\rho} + \beta^2 \right) f(\rho) \right] \quad (\text{II.2.26})$$

En remplaçant les équations (II.2.24), (II.2.25) et (II.2.26) dans l'équation (II.2.23), on obtient l'équation différentielle de la fonction restante $f(\rho)$ suivante :

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(\frac{2\lambda}{\rho} - 2\beta + \frac{1}{\rho} \right) \frac{d}{d\rho} + \frac{\lambda(\lambda - 1) - m_l^2 + \lambda}{\rho^2} + \frac{2 - 2\lambda\beta - \beta}{\rho} - K^2 + \beta^2 \right] f(\rho) = 0 \quad (\text{II.2.27})$$

Pour d'atteindre une équation différentielle connue, on met les conditions suivantes :

$$\lambda(\lambda - 1) - m_l^2 + \lambda = 0 \text{ et } \beta^2 = K^2 \quad (\text{II.2.28})$$

Où les valeurs de λ , à partir de la première condition de (II.2.24), sont données par:

$$|\lambda| = |m_l| \quad (\text{II.2.29})$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

Par un choix adéquat pour la valeur de λ dans (II.2.29), il est remarquable de noter que la fonction $f(\rho)$ doit être non singulière $a\rho = 0$ ce qui implique alors que la valeur acceptée de λ est [17] :

$$\lambda = |m_l| \quad (\text{II.2.30})$$

A ce point, l'équation (II.2.27) devient comme :

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(\frac{2\lambda + 1}{\rho} - 2\beta \right) \frac{d}{d\rho} + \frac{2 - 2\lambda\beta - \beta}{\rho} \right] f(\rho) = 0 \quad (\text{II.2.31})$$

Pour simplifier l'équation (II.2.31), on multiplie cette équation par ρ , nous obtenons:

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (2\lambda + 1 - 2\beta\rho) \frac{d}{d\rho} + 2 - 2\lambda\beta - \beta \right] f(\rho) = 0 \quad (\text{II.2.32})$$

A ce stade, selon le changement de variable suivant ($Z = 2\beta\rho$) dans l'équation (II.2.32) qui nous conduit à ($dZ = 2\beta d\rho$) pour obtenir:

$$\left[Z(2\beta) \frac{d^2}{dZ^2} + (2\lambda + 1 - Z)(2\beta) \frac{d}{dZ} + 2 - 2\lambda\beta - \beta \right] f(Z) = 0 \quad (\text{II.2.33})$$

En divisant cette équation par (2β) nous obtenons :

$$\left[Z \frac{d^2}{dZ^2} + \{(2\lambda + 1) - Z\} \frac{d}{dZ} + \frac{2 - 2\lambda\beta - \beta}{2\beta} \right] f(Z) = 0 \quad (\text{II.2.34})$$

Maintenant, afin d'avoir une solution de type polynomiale pour l'équation (II.2.34), il faut exiger et imposer les conditions suivantes sur les coefficients de la fonction d'onde $f(Z)$:

$$\mu = 2\lambda \text{ et } n = \frac{2 - 2\lambda\beta - \beta}{2\beta} \quad (\text{II.2.35})$$

Où n est un nombre entier non négatif.

En substituant (II.2.35) dans l'équation (II.2.34), on obtient :

$$\left[Z \frac{d^2}{dZ^2} + ((\mu + 1) - Z) \frac{df}{dZ} + n \right] f(Z) = 0 \quad (\text{II.2.36})$$

Dont la solution de l'équation (II.2.32) est de type confluent hypergéométrique sous la forme suivante [19]:

$$f(Z) = {}_1F_1(-n, (\mu + 1), Z) \quad (\text{II.2.37})$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

Maintenant, selon la condition : $\left(n = \frac{2-2\lambda\beta-\beta}{2\beta}\right)$ et les valeurs de (λ) et (β) , on peut obtenir l'expression du spectre de l'énergie comme:

$$\beta^2 = \frac{4}{(2n + 2\lambda + 1)^2} = K^2 = -\frac{2\hbar^2 E}{mz^2 e^4} \quad (\text{II.2.38})$$

Alors l'expression de spectre énergétique est donnée par :

$$E_{n,m_l} = \frac{-2mz^2 e^4}{\hbar^2(2n + 2\lambda + 1)^2} \quad (\text{II.2.39})$$

Donc, les valeurs propres énergétiques explicites correspondantes à notre système sont données par:

$$E_{n,m_l} = \frac{-2mz^2 e^4}{\hbar^2(2n + 2|m_l| + 1)^2} \quad (\text{II.2.40})$$

Finalement, l'expression de spectre énergétique peut s'écrire sous la forme:

$$E_{n,m_l} = \frac{-2mz^2 e^4}{\hbar^2(2n + 2|m_l| + 1)^2} \quad (\text{II.2.41})$$

Revenant à l'ancienne variable, la solution radiale du système devient comme:

$$\begin{aligned} R(\rho) &= \rho^\lambda e^{-\beta\rho} f(\rho) \\ \Rightarrow R(r) &= \left(\frac{r}{a}\right)^\lambda e^{-\beta\left(\frac{r}{a}\right)} f(r) \end{aligned} \quad (\text{II.2.42})$$

Avec :

$$f(r) = C {}_1F_1\left(-n, (2\lambda + 1), \frac{2\beta r}{a}\right)$$

Alors la solution de notre système est donnée par :

$$R(r) = C \left(\frac{r}{a}\right)^\lambda e^{-\beta\left(\frac{r}{a}\right)} {}_1F_1\left(-n, (2\lambda + 1), \frac{2\beta r}{a}\right) \quad (\text{II.2.43})$$

Où C est la constante de normalisation, qui peut être déterminé par la condition de normalisation suivante :

$$2\pi \int_0^{+\infty} |R(r)|^2 r dr = 1 \quad (\text{II.2.44})$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

Donc l'équation (II.2.44) peut être réécrite comme suit :

$$\int_0^{+\infty} \left| C \left(\frac{r}{a} \right)^\lambda e^{-\beta \left(\frac{r}{a} \right)} {}_1F_1 \left(-n, (2\lambda + 1), \frac{2\beta r}{a} \right) \right|^2 r dr = 1 \quad (\text{II.2.45})$$

Qui peut aussi être réécrite comme :

$$|C|^2 a^{-2\lambda} \int_0^{+\infty} r^{2\lambda+1} e^{-\frac{2\beta r}{a}} \left| {}_1F_1 \left(-n, (2\lambda + 1), \frac{2\beta r}{a} \right) \right|^2 dr = 1 \quad (\text{II.2.46})$$

Selon la relation entre le polynôme de Laguerre et la fonction confluyente hypergéométrique [19] :

$$L_n^u(z) = \frac{(n+u)!}{n!u!} {}_1F_1(-n, (u+1), z) \quad (\text{II.2.47})$$

Donc :

$$L_n^{2\lambda} \left(\frac{2\beta r}{a} \right) = \frac{(n+2\lambda)!}{n!2\lambda!} {}_1F_1 \left(-n, (2\lambda + 1), \frac{2\beta r}{a} \right) \quad (\text{II.2.48})$$

Ainsi, l'équation (II.2.46) devient comme:

$$|C|^2 a^{-2\lambda} \int_0^{+\infty} r^{2\lambda+1} e^{-\frac{2\beta r}{a}} \left| \left(\frac{n!2\lambda!}{(n+2\lambda)!} \right) L_n^{2\lambda} \left(\frac{2\beta r}{a} \right) \right|^2 dr = 1 \quad (\text{II.2.49})$$

Qui peut simplifier comme suit :

$$|C|^2 a^{-2\lambda} \left(\frac{n!2\lambda!}{(n+2\lambda)!} \right)^2 \int_0^{+\infty} r^{2\lambda+1} e^{-\frac{2\beta r}{a}} \left| L_n^{2\lambda} \left(\frac{2\beta r}{a} \right) \right|^2 dr = 1 \quad (\text{II.2.50})$$

Maintenant selon le changement de variables suivant : $\left[Z = 2\beta\rho = \frac{2\beta r}{a} \Rightarrow r = \frac{a}{2\beta} Z \Rightarrow \right.$

$\left. dr = \frac{a}{2\beta} dZ \right]$ et l'égalité de polynôme de Laguerre :

$$|C|^2 a^{-2\lambda} \left(\frac{n!2\lambda!}{(n+2\lambda)!} \right)^2 \int_0^{+\infty} \left(\frac{a}{2\beta} Z \right)^{2\lambda+1} e^{-\frac{2\beta}{a} \left(\frac{a}{2\beta} Z \right)} \left| L_n^{2\lambda}(Z) \right|^2 \left(\frac{a}{2\beta} \right) dZ = 1 \quad (\text{II.2.51})$$

On peut réécrire cette équation sous forme :

$$|C|^2 a^{-2\lambda} \left(\frac{n!2\lambda!}{(n+2\lambda)!} \right)^2 \left(\frac{a}{2\beta} \right)^{2\lambda+2} \int_0^{+\infty} Z^{2\lambda+1} e^{-Z} \left| L_n^{2\lambda}(Z) \right|^2 dZ = 1 \quad (\text{II.2.52})$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

Et la propriété d'identité de polynôme de Laguerre est [20]:

$$\int_0^{+\infty} q^{k+1} e^{-q} [L_n^k(q)]^2 dq = \frac{(n+k)!}{n!} (2n+k+1) \quad (\text{II.2.53})$$

Alors :

$$\int_0^{+\infty} Z^{2\lambda+1} e^{-Z} |L_n^{2\lambda}(Z)|^2 dZ = \frac{(n+2\lambda)!}{n!} (2n+2\lambda+1) \quad (\text{II.2.54})$$

Maintenant l'équation (II.2.52) devient comme:

$$|C|^2 a^{-2\lambda} \left(\frac{n! 2\lambda!}{(n+2\lambda)!} \right)^2 \left(\frac{a}{2\beta} \right)^{2\lambda+2} \frac{(n+2\lambda)!}{n!} (2n+2\lambda+1) = 1 \quad (\text{II.2.55})$$

Donc la constant de normalisation peut être écrire comme suit :

$$C = [a (2\beta)^{\lambda+1} (2\lambda)!]^{-1} \left[\frac{(n+2\lambda)!}{n! (2n+2\lambda+1)} \right]^{1/2} \quad (\text{II.2.56})$$

Finalement la solution explicite de l'équation deux dimensionnelle de Schrödinger en présence d'un potentiel central de type coulombien est donnée par fonction normalisée suivante:

$$\begin{aligned} \Psi(r, \theta) &= R(r) \Phi(\theta) \\ \Rightarrow \Psi(r, \theta) &= C \left(\frac{r}{a} \right)^\lambda e^{-\beta \left(\frac{r}{a} \right)} {}_1F_1 \left(-n, (\mu+1), \frac{2\beta r}{a} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \theta} \end{aligned} \quad (\text{II.2.57})$$

Ou bien sous la forme explicite suivante :

$$\Psi(r, \theta) = [a (2\beta)^{\lambda+1} (2\lambda)!]^{-1} \left[\frac{(n+2\lambda)!}{n! (2n+2\lambda+1)} \right]^{1/2} \left(\frac{r}{a} \right)^\lambda e^{-\beta \left(\frac{r}{a} \right)} \left(\frac{n! 2\lambda!}{(n+2\lambda)!} \right) L_n^{2\lambda} \left(\frac{2\beta r}{a} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \theta} \quad (\text{II.2.58})$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

II-3 Solution exact de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Kratzer à 2D :

Aujourd'hui, le potentiel kratzer apparaît dans divers domaines de la physique et de la chimie tels que les interfaces moléculaires, solides-liquides et la thermodynamique,

Le potentiel kratzer est parmi les potentiels physiques les plus attractifs. Terme carré inverse [7].

Dans ce travail, nous présentons un traitement quantique rigoureusement mathématique d'un mouvement non-relativiste deux dimensionnel d'un électron dans potentiel $\left(V(r) = \frac{ae^2}{r^2} - \frac{ze^2}{r}\right)$ qui est connu sous le nom de potentiel de Kratzer [7].

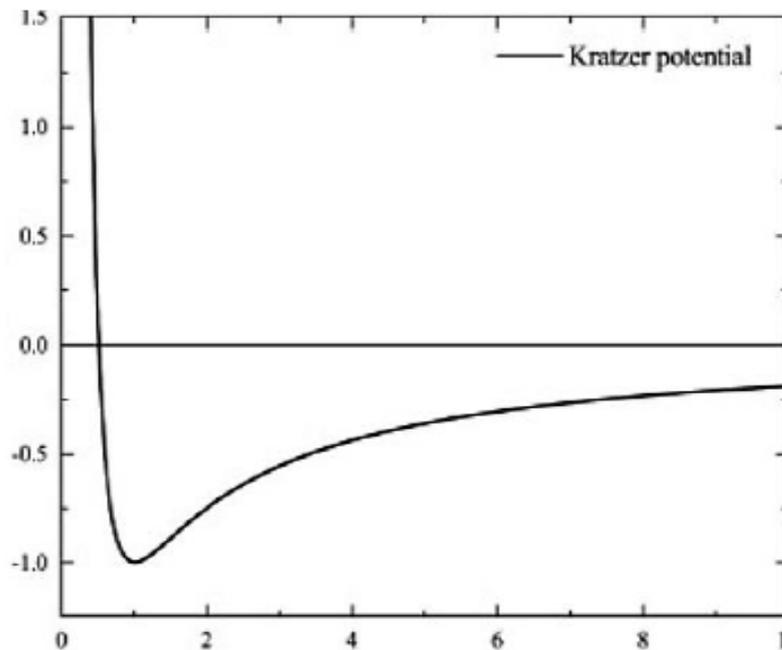


Figure II.3.1 Représentation du potentiel de kratzer.

Dans cette partie, nous allons en résolvant l'équation scalaire du Schrödinger avec la présence de potentiel de Kratzer à deux dimensions pour calculer la fonction d'onde et le spectre énergétique correspondant à ce système. Comme il a été déjà mentionné, l'équation

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

de Schrödinger à deux dimensions pour une particule scalaire évoluant dans un potentiel central de type Kratzer est donnée par :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{ze^2}{r} + \frac{de^2}{r^2} \right] \Psi(r, \theta) = E\Psi(r, \theta) \quad (\text{II.3.1})$$

Où, nous travaillons toujours avec un système de deux dimensions, alors :

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad (\text{II.3.2})$$

Donc :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) - \frac{ze^2}{r} + \frac{de^2}{r^2} \right] \Psi(r, \theta) = E\Psi(r, \theta) \quad (\text{II.3.3})$$

À ce stade, on va utiliser la séparation de fonction d'onde en deux parties fonction radiale et angulaire comme suit:

$$\Psi(r, \theta) = R(r)\Phi(\theta) \quad (\text{II.3.4})$$

Donc l'équation (II.3.3) devient comme :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) - \frac{ze^2}{r} + \frac{de^2}{r^2} \right] R(r)\Phi(\theta) = ER(r)\Phi(\theta) \quad (\text{II.3.5})$$

En divisant cette équation par $\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\right), (R(r)\Phi(\theta))$ et multiplie par (r^2) , nous obtenons :

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{2m_e ze^2}{\hbar^2 r} - \frac{2m_e de^2}{\hbar^2 r^2} \right] R(r)\Phi(\theta) = -\frac{2m_e E}{\hbar^2} ER(r)\Phi(\theta) \quad (\text{II.3.6})$$

Ou bien nous réécrivons cette équation comme ça :

$$\left[\frac{1}{R(r)} \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + r \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) + \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 \left(E + \frac{ze^2}{r} - \frac{de^2}{r^2} \right) \right] = -\frac{1}{\Phi(\theta)} \frac{\partial^2 \Phi(\theta)}{\partial \theta^2} = cst \quad (\text{II.3.7})$$

Maintenant, on a deux partie dans l'équation une radial et une angulaire, avec les deux ne dépend pas de même variable.

A solution de la partie angulaire:

$$-\frac{1}{\Phi(\theta)} \frac{\partial^2 \Phi(\theta)}{\partial \theta^2} = m_l^2 \quad (\text{II.3.8})$$

$$\Rightarrow \Phi(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \theta} ; m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

B solution de la partie radiale:

$$\left[\frac{1}{R(r)} \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + r \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) + \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 \left(E + \frac{ze^2}{r} - \frac{de^2}{r^2} \right) \right] = m_l^2 \quad (\text{II.3.9})$$

En divisant cette équation par r^2 et multiplie par $R(r)$, nous obtenons :

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} - \frac{de^2}{r^2} \right) \right] R(r) = \frac{m_l^2}{r^2} R(r) \quad (\text{II.3.10})$$

Ou bien sous forme :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m_l^2}{r^2} + \frac{2m_e ze^2}{\hbar^2 r} - \frac{2m_e de^2}{\hbar^2 r^2} + \frac{2m_e E}{\hbar^2} \right] R(r) = 0 \quad (\text{II.3.11})$$

Pour résoudre cette équation, nous utilisons même changement de variable qui utilisé dans la partie précédente:

$$\rho = \frac{r}{a}; a = \frac{\hbar^2}{zm_e e^2}; K = \sqrt{-\frac{2\hbar^2 E}{mz^2 e^4}}$$

L'équation (II.3.11) se transforme comme suit :

$$\left[\frac{1}{a^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{a^2 \rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m_l^2}{a^2 \rho^2} + \frac{2m_e ze^2}{\hbar^2 a \rho} - \frac{2m_e de^2}{\hbar^2 a^2 \rho^2} + \frac{2m_e E}{\hbar^2} \right] R(\rho) = 0 \quad (\text{II.3.12})$$

Et ensuite, on multiplie l'équation (II.2.12) par (a^2) , nous obtenons donc :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m_l^2}{\rho^2} + \frac{2m_e aze^2}{\hbar^2 \rho} - \frac{2m_e de^2}{\hbar^2 \rho^2} + \frac{2m_e a^2 E}{\hbar^2} \right] R(\rho) = 0 \quad (\text{II.3.13})$$

Qui peut être réécrit comme :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m_l^2}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{2m_e de^2}{\hbar^2 \rho^2} - K^2 \right] R(\rho) = 0 \quad (\text{II.3.14})$$

On pose que : $l'(l' + 1) = \frac{2m_e de^2}{\hbar^2} + m_l^2$, l'équation (II.3.14) se transforme à :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{l'(l' + 1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - K^2 \right] R(\rho) = 0 \quad (\text{II.3.15})$$

Maintenant, pour arriver à une équation différentielle connue, on utilise la transformation suivante:

$$R(\rho) = \rho^\lambda e^{-\beta\rho} f(\rho) \quad (\text{II.3.16})$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

Avec la première et la deuxième dérivée comme suit :

$$\frac{dR(\rho)}{d\rho} = \rho^\lambda e^{-\beta\rho} \left[\frac{df}{d\rho} + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \beta \right) f(\rho) \right] \quad (\text{II.3.17})$$

Et :

$$\frac{d^2R(\rho)}{d\rho^2} = \rho^\lambda e^{-\beta\rho} \left[\frac{d^2f(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{2\lambda}{\rho} - 2\beta \right) \frac{df(\rho)}{d\rho} + \left(\frac{\lambda}{\rho^2} (\lambda - 1) - \frac{2\lambda\beta}{\rho} + \beta^2 \right) f(\rho) \right] \quad (\text{II.3.18})$$

En substituant les équations (II.2.15) et (II.2.16) dans l'équation (II.2.13), on obtient l'équation différentielle de la fonction restante $f(\rho)$ suivante :

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(\frac{2\lambda}{\rho} - 2\beta + \frac{1}{\rho} \right) \frac{d}{d\rho} + \frac{\lambda(\lambda - 1) - l'(l' + 1) + \lambda}{\rho^2} + \frac{2 - 2\lambda\beta - \beta}{\rho} - K^2 + \beta^2 \right] f(\rho) = 0 \quad (\text{II.3.19})$$

On va utilise les conditions suivantes, pour d'atteindre une équation différentielle connue :

$$\lambda(\lambda - 1) - l'(l' + 1) + \lambda = 0 \text{ et } \beta^2 = K^2$$

Ce qui nous mène aux résultats suivant :

$$\begin{cases} \lambda = \frac{1}{2} (\pm \sqrt{4l'(l' + 1)} + 1) = \pm \sqrt{l'(l' + 1)} \\ \beta = K \end{cases}$$

Puisque nous demandons que la fonction $f(\rho)$ doit être non singulière $a\rho = 0$, ce qui implique alors que la valeur acceptée de λ est :

$$\lambda = +\sqrt{l'(l' + 1)} \quad (\text{II.3.20})$$

À ce point, l'équation (II.3.19) devient comme suit:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(\frac{2\lambda + 1}{\rho} - 2\beta \right) \frac{d}{d\rho} + \frac{2 - 2\lambda\beta - \beta}{\rho} \right] f(\rho) = 0 \quad (\text{II.3.21})$$

Qui cela peut être réécrite aisément sous la forme, d'apres multiplitation cette équation par ρ :

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (2\lambda + 1 - 2\beta\rho) \frac{d}{d\rho} + 2 - 2\lambda\beta - \beta \right] f(\rho) = 0 \quad (\text{II.3.21})$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

Toujours dans le contexte de résoudre l'équation différentielle (II.3.21) on pose la transformation suivante : ($Z = 2\beta\rho$) dans l'équation (II.3.21), qui nous conduit à ($dZ = 2\beta d\rho$) pour obtenir :

$$\left[Z(2\beta) \frac{d^2}{dZ^2} + (2\lambda + 1 - Z)(2\beta) \frac{d}{d\rho} + 2 - 2\lambda\alpha - \alpha \right] f(Z) = 0 \quad (\text{II.3.22})$$

En divisant cette équation par (2β), nous obtenons :

$$\left[Z \frac{d^2}{dZ^2} + \{(2\lambda + 1) - Z\} \frac{d}{dZ} + \frac{2 - 2\lambda\beta - \beta}{2\beta} \right] f(Z) = 0 \quad (\text{II.3.23})$$

Maintenant, afin d'avoir une solution de type polynomiale pour l'équation (II.2.21), il faut exiger et imposer les conditions suivantes sur les coefficients de la fonction d'onde $f(Z)$:

$$\mu = 2\lambda \text{ et } n = \frac{2 - 2\lambda\beta - \beta}{2\beta}$$

Où n est un nombre entier non négatif.

Donc, l'équation (II.3.23) devient comme :

$$\left[Z \frac{d^2}{dZ^2} + ((\mu + 1) - Z) \frac{df}{dZ} + n \right] f(Z) = 0 \quad (\text{II.3.24})$$

Tel que la solution de l'équation (II.3.24) est de type confluent hypergéométrique sous la forme suivante:

$$f(Z) = {}_1F_1(-n, (\mu + 1), Z)$$

Maintenant, selon la condition : $\left(n = \frac{2 - 2\lambda\beta - \beta}{2\beta} \right)$ et les valeurs de (λ) et (β) , on peut obtenir l'expression du spectre de l'énergie comme:

$$\beta^2 = \frac{4}{(2n + 2\lambda + 1)^2} = K^2 = -\frac{2\hbar^2 E}{mz^2 e^4} \quad (\text{II.3.25})$$

Alors l'expression de spectre énergétique est donnée par :

$$E_{n,m_l} = \frac{-2mz^2 e^4}{\hbar^2 (2n + 2\lambda + 1)^2} \quad (\text{II.3.26})$$

Ou bien sous la forme explicite suivante :

$$E_{n,m_l} = \frac{-2m_e z^2 e^4}{\hbar^2 \left(2n + 1 + 2\sqrt{l'(l' + 1)} \right)^2} \quad (\text{II.3.27})$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

Avec :

$$l' = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{8m_e d e^2}{\hbar^2} + 4m_l^2}$$

Finalement, l'expression de spectre énergétique peut s'écrire sous la forme:

$$E_{n,m_l} = \frac{-2m_e z^2 e^4}{\hbar^2 \left(2n + 1 + \sqrt{\frac{8m_e d e^2}{\hbar^2} + 4m_l^2} \right)^2} \quad (\text{II.3.28})$$

Donc, on va revenir à l'ancienne variable, pour cela la solution radiale du système devient comme:

$$R(\rho) = \rho^\lambda e^{-\beta\rho} f(\rho) \quad (\text{II.3.29})$$

Ou bien comme suit :

$$R(r) = \left(\frac{r}{a}\right)^\lambda e^{-\beta\left(\frac{r}{a}\right)} f(r) \quad (\text{II.3.30})$$

Avec :

$$f(r) = C' {}_1F_1\left(-n, (2\lambda + 1), \frac{2\beta r}{a}\right)$$

Alors la solution radiale du système est donnée par :

$$R(r) = C' \left(\frac{r}{a}\right)^\lambda e^{-\beta\left(\frac{r}{a}\right)} {}_1F_1\left(-n, (2\lambda + 1), \frac{2\beta r}{a}\right) \quad (\text{II.3.31})$$

Où C' est la constante de normalisation, qui peut être déterminé par la condition de normalisation suivante :

$$\int_0^{+\infty} |R(r)|^2 r dr = 1$$

Donc la condition de normalisation peut être réécrite comme suit :

$$\int_0^{+\infty} \left| C' \left(\frac{r}{a}\right)^\lambda e^{-\beta\left(\frac{r}{a}\right)} {}_1F_1\left(-n, (2\lambda + 1), \frac{2\beta r}{a}\right) \right|^2 r dr = 1 \quad (\text{II.3.32})$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

Qui peut être aussi réécrite comme ça:

$$|C'|^2 a^{-2\lambda} \int_0^{+\infty} r^{2\lambda+1} e^{-\frac{2\beta r}{a}} \left| {}_1F_1\left(-n, (2\lambda+1), \frac{2\beta r}{a}\right) \right|^2 dr = 1 \quad (\text{II.3.33})$$

Selon la relation entre le polynôme de Laguerre et la fonction confluyente hypergéométrique :

$$L_n^u(z) = \frac{(n+u)!}{n!u!} {}_1F_1(-n, (u+1), z) \quad (\text{II.3.34})$$

Alors :

$$L_n^{2\lambda}\left(\frac{2\beta r}{a}\right) = \frac{(n+2\lambda)!}{n!2\lambda!} {}_1F_1\left(-n, (2\lambda+1), \frac{2\beta r}{a}\right) \quad (\text{II.3.35})$$

Donc, l'équation (II.3.33) devient comme:

$$|C'|^2 a^{-2\lambda} \int_0^{+\infty} r^{2\lambda+1} e^{-\frac{2\beta r}{a}} \left| \left(\frac{n!2\lambda!}{(n+2\lambda)!}\right) L_n^{2\lambda}\left(\frac{2\beta r}{a}\right) \right|^2 dr = 1 \quad (\text{II.3.36})$$

Ou bien peut être simplifié cette équation comme ça :

$$|C'|^2 a^{-2\lambda} \left(\frac{n!2\lambda!}{(n+2\lambda)!}\right)^2 \int_0^{+\infty} r^{2\lambda+1} e^{-\frac{2\beta r}{a}} \left| L_n^{2\lambda}\left(\frac{2\beta r}{a}\right) \right|^2 dr = 1 \quad (\text{II.3.37})$$

Maintenant selon le changement de variables suivant : $[Z = 2\beta\rho = \frac{2\beta r}{a} \Rightarrow r = \frac{a}{2\beta}Z \Rightarrow dr = \frac{a}{2\beta}dZ]$ et l'égalité de polynôme de Laguerre :

$$|C'|^2 a^{-2\lambda} \left(\frac{n!2\lambda!}{(n+2\lambda)!}\right)^2 \int_0^{+\infty} \left(\frac{a}{2\beta}Z\right)^{2\lambda+1} e^{-\frac{2\beta}{a}\left(\frac{a}{2\beta}Z\right)} \left| L_n^{2\lambda}(Z) \right|^2 \left(\frac{a}{2\beta}\right) dZ = 1 \quad (\text{II.3.38})$$

On peut simplifié l'équation (II.3.38) comme :

$$|C'|^2 a^{-2\lambda} \left(\frac{n!2\lambda!}{(n+2\lambda)!}\right)^2 \left(\frac{a}{2\beta}\right)^{2\lambda+2} \int_0^{+\infty} Z^{2\lambda+1} e^{-Z} \left| L_n^{2\lambda}(Z) \right|^2 dZ = 1 \quad (\text{II.3.39})$$

Et la propriété d'identité de polynôme de Laguerre [20]:

$$\int_0^{+\infty} q^{k+1} e^{-q} [L_n^k(q)]^2 dq = \frac{(n+k)!}{n!} (2n+k+1) \quad (\text{II.3.40})$$

Chapitre II : solution exact de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel de kratzer à 2D

Alors :

$$\int_0^{+\infty} Z^{2\lambda+1} e^{-Z} |L_n^{2\lambda}(Z)|^2 dZ = \frac{(n+2\lambda)!}{n!} (2n+2\lambda+1) \quad (\text{II.3.41})$$

Donc l'équation (II.3.39) devient comme :

$$|C'|^2 a^{-2\lambda} \left(\frac{n! 2\lambda!}{(n+2\lambda)!} \right)^2 \left(\frac{a}{2\beta} \right)^{2\lambda+2} \frac{(n+2\lambda)!}{n!} (2+2\lambda+1) = 1 \quad (\text{II.3.42})$$

Ou bien peut être écrire la constant de normalisation comme suit:

$$C' = [a (2\beta)^{\lambda+1} (2\lambda)!]^{-1} \left[\frac{(n+2\lambda)!}{n! (2n+2\lambda+1)} \right]^{1/2} \quad (\text{II.3.43})$$

Finalemnt la solution explicite de l'équation deux dimensionnelle de Schrödinger en présence d'un potentiel central de type kratzer est donnée par fonction normalisée suivante:

$$\Psi(r, \theta) = R(r)\Phi(\theta) \quad (\text{II.3.44})$$

$$\Rightarrow \Psi(r, \theta) = C' \left(\frac{r}{a} \right)^\lambda e^{-\beta \left(\frac{r}{a} \right)} {}_1F_1 \left(-n, (\mu+1), \frac{2\beta r}{a} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \theta} \quad (\text{II.3.44})$$

Qui peut simplifié à la forme explicite suivante :

$$\Psi(r, \theta) = [a (2\beta)^{\lambda+1} (2\lambda)!]^{-1} \left[\frac{(n+2\lambda)!}{n! (2n+2\lambda+1)} \right]^{1/2} \left(\frac{r}{a} \right)^\lambda e^{-\beta \left(\frac{r}{a} \right)} \left(\frac{n! 2\lambda!}{(n+2\lambda)!} \right) L_n^{2\lambda} \left(\frac{2\beta r}{a} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \theta} \quad (\text{II.3.45})$$

Chapitre III

**Solution exacte de
l'équation de Schrödinger
avec le potentiel de
kratzer non central à deux
dimensions**

III.1 Introduction :

L'équation d'onde quantique Schrödinger est un très bon point de départ pour l'étude des systèmes atomiques et moléculaires. Malheureusement, cette équation a des solutions analytiques pour très peu de types de potentiels et la majorité sont centrales. La complexité de l'étude des systèmes multi particules a obligé les théoriciens à utiliser des modèles à champ moyen, dont la plupart sont également centraux. Ces potentiels centraux ne correspondent pas à la réalité des systèmes physiques, à l'exception du potentiel de Coulomb qui correspond parfaitement à l'hydrogène car il ne s'agit que d'un système à deux particules [20].

Lorsque nous étudions des potentiels non centraux, la difficulté apparaît déjà dans l'équation de Schrödinger, où la séparation des variables n'est possible que lorsque le potentiel est du type $V(r, \theta, \varphi) = V(r) + \frac{V(\theta)}{r^2} + \frac{V(\varphi)}{r^2 \sin^2(\theta)}$, et parmi celles-ci, seules quelques unes peuvent être étudiées analytiquement. L'étude de ce type de potentiel a débuté avec les travaux de Makarov et Hartmann sur les systèmes moléculaires et se concentre maintenant dans divers domaines, notamment en chimie quantique et en physique nucléaire. Par exemple, ils ont été utilisés pour la description de molécules en forme d'anneau comme le benzène et également pour les interactions entre une paire de noyaux déformée [20].

Le potentiel non central Le plus simple est le dipôle électrique $V(r, \theta) = \frac{D \cos(\theta)}{r^2}$ (ou dipôle pur) et il a attiré l'attention très tôt parce qu'il y avait des indices expérimentaux qu'il n'aurait pu relier des états que si son moment dépassait une valeur critique. Des études expérimentales ont suivi et ont confirmé ces résultats malgré l'absence de solutions analytiques pour ce système. Ce potentiel a également attiré l'attention en chimie compte tenu de ses applications dans les limites anioniques des molécules polaires. Aussi en biologie moléculaire dans l'étude des mécanismes de liaison des électrons dans l'ADN et l'ARN [20].

D'un point de vue théorique, le potentiel dipolaire pur a été étudié dans le cas de systèmes 3D ainsi que dans les systèmes 1D et 2D. Des études théoriques ont également porté sur le potentiel du dipôle k non pur $V(r, \theta) = Q/r^2 + D \cos \theta / r^2$, dans les systèmes 3D et 2D. Pour ce dernier potentiel, les deux cas ont montré que le dipôle doit être inférieur

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

à une valeur critique pour avoir des états liés dans le système, Ces résultats sont à l'opposé de ceux du dipôle pur [20].

Dans ce chapitre, on va résoudre l'équation de Schrödinger pour un nouveau type de potentiel non central qui est consistant à combiner un potentiel de Kratzer et un terme dipolaire, ou bien nous appelons Le potentiel de Kratzer non central dans le cas de systèmes 2D nous utilisant la séparation de variables et les équations de Mathieu pour la partie angulaire. Afin de calculer la fonction d'onde exacte et le spectre énergétique correspondant.

III.2 Le potentiel de Kratzer non central :

Nous considérons un système composé d'une charge ponctuelle q dans le potentiel d'une distribution de charge $Q = \int dq$, (un groupe de points charge dq) telle qu'un ion et une particule chargée. La charge étendue Q produit le potentiel suivant à la position de la charge d'essai q [20] :

$$V(\vec{r}) = \int \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{dq_a}{r_a} \quad (\text{III.2.1})$$

On choisit l'origine O de la référence au centre de Q , on note M la position de q et \vec{r} le vecteur correspondant. On va met \vec{A} ou a la position de la charge élémentaire dq , donc la position relative de la charge ponctuelle q est $\vec{r}_a = \vec{AM} = \vec{OM} - \vec{OA} = \vec{r} - \vec{a}$ [20].

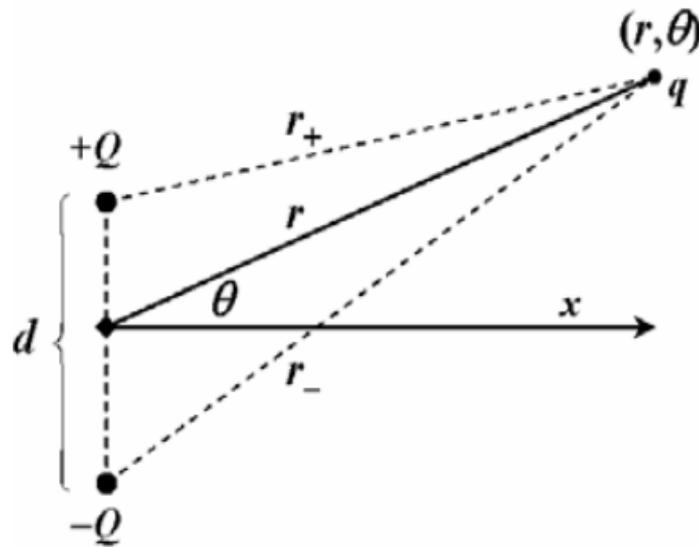


Figure III.2.1 La configuration du dipôle électrique en 2D avec $d \ll r$ [21].

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

Où bien peut être écrit l'expression (III.2.1) comme suit :

$$V(\vec{r}) = \int \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{dq_a}{\|\vec{r} - \vec{a}\|} = \int \frac{1}{4\pi\epsilon_0} dq_a [(\vec{r} - \vec{a})^2]^{-1/2} \quad (\text{III.2.2})$$

Nous utilisons les séries de Taylor pour écrire l'intégrale car nous considérons que les dimensions du cluster caractérisé par $\|\vec{a}\|$ sont petites comparées au système complet représenté par $\|\vec{r}\|$, nous obtenons [20]:

$$V(\vec{r}) = \int \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{dq_a}{r} \left[\left(1 - 2 \frac{\vec{r} \cdot \vec{a}}{r^2} + \frac{\vec{a}^2}{r^2} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (\text{III.2.3})$$

Nous nous limitons au 1er ordre pour l'expansion multipolaire [20] :

$$\left[\left(1 - 2 \frac{\vec{r} \cdot \vec{a}}{r^2} + \frac{\vec{a}^2}{r^2} \right)^2 \right]^{-1/2} = 1 + \frac{\vec{r} \cdot \vec{a}}{r^2} + \mathcal{O} \left(\frac{\vec{a}^2}{r^2} \right) \quad (\text{III.2.4})$$

Alors, nous obtenons :

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\int \frac{dq_a}{r} + \int \frac{dq_a \vec{r} \cdot \vec{a}}{r^2} \right) \quad (\text{III.2.5})$$

Qui peut être simplifié comme suit:

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r} \int dq_a + \frac{1}{r^2} \int a \cos \theta_a dq_a \right) \quad (\text{III.2.6})$$

Où l'élément de volume dans l'intégrale est celui autour de la position \vec{a} de dq_a , donc la position \vec{r} de la charge q est une constante en fonction de cette intégration et le potentiel devient comme [20] :

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{r} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{D_r}{r^2} \quad (\text{III.2.7})$$

D_r Représente le moment dipolaire de la grappe et il est désigné par l'indice r car on peut le considérer comme un « radial » ou un dipôle dont le moment pointe toujours vers la charge d'essai q [20].

La relation (III.2.7) est équivalente à l'expression de Kratzer définie par :

$$V_K(r) = d_e \left(\frac{r_e^2}{r^2} - \frac{2r_e}{r} \right) \quad (\text{III.2.8})$$

Où nous considérons que d_e est l'énergie de dissociation et r_e la séparation interatomique à l'équilibre dans la molécule. Nous voyons que le potentiel est central et cela ne peut pas

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

refléter la réalité car la distribution n'est généralement pas parfaitement symétrique. Par conséquent, nous devons tenir compte de la possible anisotropie dans la distribution des charges. Pour ce faire, nous considérons que les centres de charges positifs et négatifs ne coïncident pas dans Q et nous désignons leurs positions \vec{a}_+ et \vec{a}_- . Ces deux centres forment un dipôle électrique représentant cette anisotropie et le potentiel d'un tel dipôle est juste $\frac{D\cos\theta}{r^2}$. Le moment dipolaire D_θ est proportionnel à la distance entre les deux centres de charge et l'angle θ définit l'orientation de la position \vec{r} en fonction de l'axe du dipôle défini par \vec{a}_+ et \vec{a}_- . Nous appelons ce terme le dipôle «angulaire» pour le différencier du dipôle «radial». D'après quand nous ajoute tous les termes ensemble nous donne le potentiel de Coulomb à deux dipôles et nous l'appelons un potentiel de Kratzer non central (N-C) [20] :

$$V(r, \theta) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{r} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{D_r}{r^2} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{D_\theta \cos\theta}{r^2} \quad (\text{III.2.8})$$

Cette expression prend en compte le caractère non ponctuel d'un système ionique agissant sur une charge élémentaire ainsi que l'anisotropie de la répartition de la charge de cet ion. Il représente la première correction de l'effet de Coulomb d'une charge étendue [20].

III.3 Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de kratzer, non central a deux dimensions :

L'équation de Schrödinger à deux dimensions pour une particule scalaire évoluant dans un potentiel dipolaire en plus de potentiel de coulomb et kratzer donnée par :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + V(r, \theta) \right] \Psi(r, \theta) = E\Psi(r, \theta) \quad (\text{III.3.1})$$

Où $V(r, \theta) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Q}{r} + \frac{D_r}{r^2} + \frac{D_\theta \cos\theta}{r^2} \right)$.

On est donc amené à résoudre l'équation suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Q}{r} + \frac{D_r}{r^2} + \frac{D_\theta \cos\theta}{r^2} \right) \right] \Psi(r, \theta) = E\Psi(r, \theta) \quad (\text{III.3.2})$$

Qui peut être réécrit comme suit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Q}{r} + \frac{D_r}{r^2} + \frac{D_\theta \cos\theta}{r^2} \right) \right] \Psi(r, \theta) = E\Psi(r, \theta) \quad (\text{III.3.3})$$

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

Nous utilisons la séparation des variables radiales et angulaires pour écrire la solution comme [19] :

$$\Psi(r, \theta) = u(r)\Phi(\theta) = r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta) \quad (\text{III.3.4})$$

Alors, l'équation (III.3.3) devient comme :

$$\begin{aligned} -\Phi(\theta) \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) u(r) - u(r) \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \Phi(\theta) + \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Q}{r} + \frac{D_r}{r^2} + \frac{D_\theta \cos\theta}{r^2} \right) u(r)\Phi(\theta) \\ = Eu(r)\Phi(\theta) \end{aligned} \quad (\text{III.3.5})$$

En divisant cette équation par $(u(r)\Phi(\theta))$ et multiplie par (r^2) , nous obtenons :

$$\begin{aligned} -\frac{r^2}{u(r)} \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) u(r) \right] - \frac{1}{\Phi(\theta)} \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Phi(\theta) + \frac{q}{4\pi\epsilon_0} (Qr + D_r + D_\theta \cos\theta) - Er^2 \\ = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.3.6})$$

Et ensuite, on divisant l'équation (III.3.6) par $\left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\right)$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} -\frac{r^2}{u(r)} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) u(r) \right] - \frac{1}{\Phi(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Phi(\theta) + \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{2m_e}{\hbar^2} (Qr + D_r + D_\theta \cos\theta) - \frac{2m_e}{\hbar^2} Er^2 \\ = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.3.7})$$

Ou bien nous réécrivons cette équation comme ça :

$$\begin{aligned} -\frac{r^2}{u(r)} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) u(r) \right] + \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{2m_e}{\hbar^2} (Qr + D_r) - \frac{2m_e}{\hbar^2} Er^2 \\ = \frac{1}{\Phi(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Phi(\theta) - \frac{2m_e q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} D_\theta \cos\theta = cst \end{aligned} \quad (\text{III.3.8})$$

On va diviser l'équation en deux parties, angulaire et radiale :

Partie angulaire :

$$\frac{1}{\Phi(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Phi(\theta) - \frac{2m_e q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} D_\theta \cos\theta = E_\theta \quad (\text{III.3.9})$$

Qui peut simplifier comme :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{2m_e q D_\theta}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \cos\theta \right) \Phi(\theta) = E_\theta \Phi(\theta) \quad (\text{III.3.10})$$

Partie radiale :

$$-\frac{r^2}{u(r)} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) u(r) \right] + \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{2m_e}{\hbar^2} (Qr + D_r) - \frac{2m_e}{\hbar^2} Er^2 = E_\theta \quad (\text{III.3.11})$$

En multiplie cette équation par $(u(r))$ et divisant sur $(-r^2)$, nous obtenons :

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left[E - \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Q}{r} + \frac{D_r}{r^2} \right) \right] \frac{2m_e}{\hbar^2} \right] u(r) = -\frac{E_\theta}{r^2} u(r) \quad (\text{III.3.12})$$

Où $u(r) = r^{-1/2}R(r)$, avec la première et la deuxième dérivée comme suit :

$$\frac{\partial u(r)}{\partial r} = -\frac{1}{2} r^{-3/2} R(r) + r^{-1/2} \frac{\partial R(r)}{\partial r} \quad (\text{III.3.13})$$

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

Et :

$$\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} = \frac{3}{4} r^{-5/2} R(r) - r^{-3/2} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + r^{-1/2} \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} \quad (\text{III.3.14})$$

Maintenant, en remplace les équations (III.3.13) et (III.3.14) dans l'équation (III.3.12), on obtient l'équation différentielle de la fonction $R(r)$ suivante :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(E_\theta + \frac{1}{4} - \frac{2m_e q D_r}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right) \frac{1}{r^2} - \frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{r} \right] R(r) = -\frac{2m_e E}{\hbar^2} R(r) \quad (\text{III.3.15})$$

Dans ce cas, on a deux parties pour cette équation:

Partie angulaire :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{2m_e q D_\theta}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \cos\theta \right) \Phi(\theta) = E_\theta \Phi(\theta) \quad (\text{III.3.16})$$

Partie radial :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(E_\theta + \frac{1}{4} - \frac{2m_e q D_r}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right) \frac{1}{r^2} - \frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{r} \right] R(r) = -\frac{2m_e E}{\hbar^2} R(r) \quad (\text{III.3.17})$$

Pour extraire les valeurs propres énergétiques du système ainsi que les fonctions propres $\Psi(r, \theta)$, on résout d'abord l'équation angulaire pour trouver les valeurs propres E_θ , qui peut ensuite être utilisé pour résoudre la partie radiale.

A Solution de l'équation angulaire :

On a :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - E_\theta - \frac{2m_e q D_\theta}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \cos\theta \right) \Phi(\theta) = 0$$

Qui peut être tout simplement réécrit cette équation à la forme de équation de Mathieu, d'après le changement de variable suivante [20] :

$$\theta = 2z, a = -4E_\theta \text{ et } p = \frac{m_e q D_\theta}{\pi\epsilon_0 \hbar^2} \quad (\text{III.3.18})$$

Alors, se transforme cette équation comme :

$$\frac{1}{4} \frac{\partial^2 \Phi(z)}{\partial z^2} + \left[\frac{1}{4} a - \frac{1}{2} p \cos 2z \right] \Phi(z) = 0 \quad (\text{III.3.19})$$

On va multiplier l'équation (III.3.18) par (4), nous obtenons :

$$\frac{\partial^2 \Phi(z)}{\partial z^2} + [a - 2p \cos 2z] \Phi(z) = 0 \quad (\text{III.3.20})$$

Les solutions de cette équation sont le cosinus-elliptique $ce_{2m}(z)$ et le sinus-elliptique $se_{2m+2}(z)$ fonctions où m est un nombre naturel, les solutions de l'équation de Mathieu sont périodiques car z a une période de π (puisque période de θ est 2π), ce qui nous amène à considérer le théorème de Floquet ou le théorème de Bloch. Ils stipulent que,

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

pour une valeur donnée du paramètre p , la solution n'est périodique que pour certaines valeurs de l'autre paramètre a . On appelle les valeurs caractéristiques $a(2m, p)$ ou $a_{2m}(p)$ for the cosine solutions et $b(2m, p)$ ou $b_{2m}(p)$ pour les sinus [20].

Il n'y a pas d'expression analytique pour les valeurs caractéristiques de Mathieu $a_{2m}(p)$ et $b_{2m}(p)$, elles sont donc généralement données numériquement ou graphiquement. Malgré tout, nous puissions écrire des expressions analytiques approximatives pour les valeurs petites et grandes de p . Pour petites valeurs de p , on peut exprimer a et b pour $m > 3$ comme [20]:

$$a_{2m} = b_{2m} \approx 4m^2 + \frac{1}{2(4m^2 - 1)}p^2 + \frac{20m^2 + 7}{32(4m^2 - 1)^3(4m^2 - 4)}p^4 + \frac{36m^4 + 232m^2 + 29}{64(4m^2 - 1)^5(4m^2 - 4)(4m^2 - 9)}p^6 + \mathcal{O}(p^8) \quad (\text{III.3.21})$$

Où Les coefficients des séries de puissance de $a_{2m}(p)$ et $b_{2m}(p)$ sont les mêmes jusqu'à ce que les termes de p^{2m-2} [20].

En plus de ça, on à des polynômes similaires pour $m \leq 3$ mais avec des coefficients différents pour les a 's et b 's [20].

Nous notons ici, il n'y a pas de solution de sinus pour $m = 0$ et qu'il n'ya donc pas b ($m = 0$) [20].

Pour les grandes valeurs de p , on obtient autre polynôme ($k = 2n + 1$):

$$a_n = b_{n+1} \approx -2p + 2kp^{1/2} - \frac{1}{8}[k^2 + 1] - \frac{1}{27p^{1/2}}[k^3 + 3k] - \frac{1}{2^{12}p}[5k^4 + 34k^2 + 9] + \mathcal{O}(p^{-3/2}) \quad (\text{III.3.22})$$

Finalement, a partir de maintenant pour simplifier l'écriture, nous allons utiliser le même symbole $c_{2m}(p)$ pour les valeurs caractéristiques $a_{2m}(p)$ et $b_{2m}(p)$ [20].

Aussi en utilisant les expressions de la caractéristique et les relations précédent $a = -4E_\theta$ et $p = \frac{m_e q D}{\pi \epsilon_0 \hbar^2}$, nous obtenons les valeurs propres E_θ en fonction du moment électrique du système D_θ [20].

$$E_\theta^{(2m)} = -\frac{1}{4}c_{2m}\left(\frac{mq}{\pi \epsilon_0 \hbar^2}D_\theta\right) \quad (\text{III.3.23})$$

On voit que dans la limite $p \rightarrow 0$ (ou $D_\theta \rightarrow 0$), nous obtenons $a = 4m^2$ Ainsi, les valeurs de caractéristique peuvent dans tous les cas être écrites comme :

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

$$a_{2m} = 4m^2 + P_m(p) \quad (\text{III.3.24})$$

C'est la même chose pour les valeurs propres angulaires, on a [20] :

$$E_\theta^{(2m)} = -m^2 + P_m(D_\theta) \quad (\text{III.3.25})$$

Où $P_m(p)$ et $P_m(D_\theta)$ sont des polynômes qui sont écrits en termes de même des pouvoirs de p et D_θ à partir de 2 [20].

Ensuite, nous utilisons l'expression de $E_\theta^{(2m)}$ afin de résoudre l'équation radiale.

B Solution de l'équation radiale :

Nous réécrivons l'équation radiale en terme de $E_\theta^{(m)}$ comme suit :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(E_\theta^{(m)} + \frac{1}{4} - \frac{2m_e q D_r}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right) \frac{1}{r^2} - \frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{r} + \frac{2m_e E}{\hbar^2} \right] R(r) = 0 \quad (\text{III.3.26})$$

On utilise la transformation suivante:

$$R(r) = r^\lambda e^{-\beta r} f(r) \quad (\text{III.3.27})$$

Avec la première et la deuxième dérivée comme suit :

$$\frac{dR(r)}{dr} = r^\lambda e^{-\beta r} \left[\frac{df(r)}{dr} + \left(\frac{\lambda}{r} - \beta \right) f(r) \right] \quad (\text{III.3.28})$$

Et :

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} = r^\lambda e^{-\beta r} \left[\frac{d^2 f(r)}{dr^2} + \left(\frac{2\lambda}{r} - 2\beta \right) \frac{df(r)}{dr} + \left(\frac{\lambda}{r^2} (\lambda - 1) - \frac{2\lambda\beta}{r} + \beta^2 \right) f(r) \right] \quad (\text{III.3.29})$$

Donc, On va remplace (III.3.27), (III.3.28) et (III.3.29) dans l'équation (III.3.26), puis on résout l'équation obtenue :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{2\lambda}{r} - 2\beta \right) \frac{d}{dr} + \frac{\lambda(\lambda - 1) + E_\theta^{(m)} + 1/4 - \frac{2m_e q D_r}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} - \frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} + 2\lambda\beta}{r^2} + \beta^2 + \frac{2m_e E}{\hbar^2} \right] f(r) = 0 \quad (\text{III.3.30})$$

De la même manière qu'avant, on met les conditions suivantes pour d'atteindre une équation différentielle connue :

$$\beta^2 = -\frac{2m_e E}{\hbar^2}, \quad \text{et} \quad \lambda(\lambda - 1) + E_\theta^{(m)} + \frac{1}{4} - \frac{2m_e q D_r}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = 0 \quad (\text{III.3.31})$$

La résolution de λ dans la dernière équation donne deux solutions ils sont :

$$\lambda = \frac{1}{2} \pm \sqrt{-E_\theta^{(m)} + \frac{2m_e q D_r}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}} \quad (\text{III.3.32})$$

La valeur acceptée de λ , pour obtenue une fonction $f(r)$ doit être non singulière $r = 0$ est :

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

$$\lambda = \frac{1}{2} + \sqrt{-E_{\theta}^{(m)} + \frac{2m_e q D_r}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}} \quad (\text{III.3.33})$$

À ce point, l'équation (III.3.30) devient comme suit:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{2\lambda}{r} - 2\beta \right) \frac{d}{dr} - \frac{\frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} + 2\lambda\beta}{r} \right] f(r) = 0 \quad (\text{III.3.34})$$

Qui cela peut être réécrite aisément sous la forme:

$$\left[r \frac{d^2}{dr^2} + (2\lambda - 2\beta r) \frac{d}{dr} - \frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} - 2\lambda\beta \right] f(r) = 0 \quad (\text{III.3.35})$$

A ce stade, selon le changement de variable suivant ($Z = 2\beta r$) dans l'équation (III.3.35) qui nous conduit à ($dZ = 2\beta dr$) pour obtenir:

$$\left[\frac{z}{2\beta} (2\beta)^2 \frac{d^2}{dz^2} + (2\lambda - z)(2\beta) \frac{d}{dz} - \frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} - 2\lambda\beta \right] f(z) = 0 \quad (\text{III.3.36})$$

En divisant cette équation par (2β), nous obtenons :

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (2\lambda - z) \frac{d}{dz} - \left(\frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{\beta} + \lambda \right) \right] f(z) = 0 \quad (\text{III.3.37})$$

Maintenant, afin d'avoir une solution de type polynomiale pour l'équation (III.3.37), il faut exiger et imposer les conditions suivantes sur les coefficients de la fonction d'onde $f(r)$:

$$\mu + 1 = 2\lambda \text{ et } n_r = - \left(\frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{\beta} + \lambda \right) \quad (\text{III.3.38})$$

En substituant (III.3.38) dans l'équation (III.3.37), on obtient :

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + ((\mu + 1) - z) \frac{d}{dz} + n_r \right] f(z) = 0 \quad (\text{III.3.39})$$

Dont la solution de l'équation (III.3.39) est de type confluent hypergéométrique sous la forme suivante:

$$f(Z) = {}_1F_1(-n_r, (\mu + 1), Z) \quad (\text{III.3.40})$$

Maintenant, la solution radiale du système devient comme :

$$R(r) = r^\lambda e^{-\beta r} f(r) \quad (\text{III.3.41})$$

Avec :

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

$$f(r) = N {}_1F_1 \left(\left(\frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \beta} + \lambda \right), 2\lambda, 2\beta r \right) \quad (\text{III.3.42})$$

Alors la solution du système radial devient comme:

$$R(r) = N r^\lambda e^{-\beta r} {}_1F_1 \left(\left(\frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \beta} + \lambda \right), 2\lambda, 2\beta r \right) \quad (\text{III.3.43})$$

Où N est la constante de normalisation, qui peut être déterminé par la condition de normalisation suivante :

$$\int |\Psi(r, \theta)|^2 r dr d\theta = 1 \quad (\text{III.3.44})$$

Avec $\Psi(r, \theta) = r^{-1/2} R(r) \Phi(\theta)$, alors :

$$\int_0^{+\infty} |r^{-1/2} R(r)|^2 r dr \int_0^{2\pi} |\Phi(\theta)|^2 d\theta = 1 \quad (\text{III.3.45})$$

Où on rappelle que les fonctions de Mathieu sont normalisées par définition à π . Pour cette raison nous obtenons :

$$\pi^2 \int_0^{+\infty} |r^{-1/2} R(r)|^2 r dr = 1 \quad (\text{III.3.46})$$

Donc l'équation (III.3.46) peut être réécrite comme suit :

$$\pi^2 \int_0^{+\infty} \left| N r^\lambda e^{-\beta r} {}_1F_1 \left(\left(\frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \beta} + \lambda \right), 2\lambda, 2\beta r \right) \right|^2 dr = 1 \quad (\text{III.3.47})$$

Ou bien comme :

$$|N|^2 \pi^2 \int_0^{+\infty} r^{2\lambda} e^{-2\beta r} \left| {}_1F_1 \left(\left(\frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \beta} + \lambda \right), 2\lambda, 2\beta r \right) \right|^2 dr = 1 \quad (\text{III.3.48})$$

On va appliquer la relation entre le polynôme de Laguerre et la fonction confluyente hypergéométrique :

$$L_{n_r}^{2\lambda-1}(2\beta r) = \frac{(n_r + 2\lambda - 1)!}{n_r! (2\lambda - 1)!} {}_1F_1 \left(\left(\frac{2m_e q Q}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \beta} + \lambda \right), 2\lambda, 2\beta r \right) \quad (\text{III.3.49})$$

Donc l'équation (III.3.48) devient comme:

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

$$|N|^2 \pi^2 \int_0^{+\infty} r^{2\lambda} e^{-2\beta r} \left| \frac{n_r! (2\lambda - 1)!}{(n_r + 2\lambda - 1)!} L_{n_r}^{2\lambda-1}(2\beta r) \right|^2 dr = 1 \quad (\text{III.3.50})$$

Qui peut être réécrit comme :

$$|N|^2 \left(\frac{n_r! (2\lambda - 1)!}{(n_r + 2\lambda - 1)!} \right)^2 \pi^2 \int_0^{+\infty} r^{2\lambda} e^{-2\beta r} |L_{n_r}^{2\lambda-1}(2\beta r)|^2 dr = 1 \quad (\text{III.3.51})$$

On va appliquer le changement de variables suivant : $[Z = 2\beta r \Rightarrow r = \frac{1}{2\beta} Z \Rightarrow dr = \frac{1}{2\beta} dZ]$

et l'égalité de polynôme de Laguerre :

$$|N|^2 \left(\frac{n_r! (2\lambda - 1)!}{(n_r + 2\lambda - 1)!} \right)^2 \pi^2 \int_0^{+\infty} \left(\frac{1}{2\beta} Z \right)^{2\lambda} e^{-2\beta \left(\frac{1}{2\beta} Z \right)} \left| L_{n_r}^{2\lambda-1} \left(2\beta \left(\frac{1}{2\beta} Z \right) \right) \right|^2 \left(\frac{1}{2\beta} \right) dZ = 1 \quad (\text{III.3.52})$$

Qui peut simplifier comme suit :

$$|N|^2 \left(\frac{n_r! (2\lambda - 1)!}{(n_r + 2\lambda - 1)!} \right)^2 \left(\frac{1}{2\beta} \right)^{2\lambda+1} \pi^2 \int_0^{+\infty} z^{2\lambda} e^{-z} |L_{n_r}^{2\lambda-1}(z)|^2 dZ = 1 \quad (\text{III.3.53})$$

Où la propriété d'identité de polynôme de Laguerre:

$$\int_0^{+\infty} q^{k+1} e^{-q} [L_{n_r}^k(q)]^2 dq = \frac{(n_r + k)!}{n_r!} (2n_r + k + 1) \quad (\text{III.3.54})$$

Alors :

$$\int_0^{+\infty} z^{2\lambda} e^{-z} |L_{n_r}^{2\lambda-1}(z)|^2 dZ = \frac{(n_r + 2\lambda - 1)!}{n_r!} (2n_r + 2\lambda) \quad (\text{III.3.55})$$

Maintenant l'équation (III.3.53) devient comme:

$$|N|^2 \left(\frac{n_r! (2\lambda - 1)!}{(n_r + 2\lambda - 1)!} \right)^2 \left(\frac{1}{2\beta} \right)^{2\lambda+1} \frac{(n_r + 2\lambda - 1)!}{n_r!} (2n_r + 2\lambda) \pi^2 = 1 \quad (\text{III.3.56})$$

Ou bien sous la forme explicite suivante :

$$|N|^2 = \frac{1}{\left(\frac{n_r! (2\lambda - 1)!}{(n_r + 2\lambda - 1)!} \right)^2 \left(\frac{1}{2\beta} \right)^{2\lambda+1} \frac{(n_r + 2\lambda - 1)!}{n_r!} (2n_r + 2\lambda) \pi^2} \quad (\text{III.3.57})$$

Donc la constant de normalisation peut être réécrire comme suit :

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

$$N = \frac{2^\lambda \beta^{\lambda + \frac{1}{2}}}{(2\lambda - 1)! \pi} \left[\frac{(n_r + 2\lambda - 1)!}{n_r! (n_r + \lambda)} \right]^{1/2} \quad (\text{III.3.55})$$

Finalement la solution explicite de l'équation deux dimensionnelle de Schrödinger en présence d'un potentiel central de type kratzer et d'un potentiel non central de type dipôle est donnée par fonction normalisée suivante:

$$\Psi(r, \theta) = r^{-1/2} R(r) \Phi(\theta) \quad (\text{III.3.56})$$

$$\Rightarrow \Psi(r, \theta) = N r^{\lambda - 1/2} e^{-\beta r} {}_1F_1 \left(\left(\lambda - \frac{1}{\beta} \right), 2\lambda, 2\beta r \right) \Phi(\theta) \quad (\text{III.3.57})$$

$$\Rightarrow \Psi(r, \theta) = \frac{2^\lambda \beta^{\lambda + \frac{1}{2}}}{(2\lambda - 1)!} \left[\frac{(n_r + 2\lambda - 1)!}{n_r! (n_r + \lambda)} \right]^{1/2} r^{\lambda - 1/2} e^{-\beta r} {}_1F_1 \left(\left(\lambda - \frac{1}{\beta} \right), 2\lambda, 2\beta r \right) \Phi(\theta) \quad (\text{III.3.58})$$

$$\Rightarrow \Psi(r, \theta) = \frac{2^\lambda \beta^{\lambda + \frac{1}{2}}}{(2\lambda - 1)!} \left[\frac{(n + 2\lambda - 1)!}{n! (n + \lambda)} \right]^{1/2} r^{\lambda - 1/2} e^{-\beta r} \left(\frac{n_r! (2\lambda - 1)!}{(n_r + 2\lambda - 1)!} \right) L_{n_r}^{2\lambda - 1}(2\beta r) c_{2m} \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad (\text{III.3.59})$$

D'autre part, selon la condition : $\left(n_r = - \left(\frac{2m_e q Q}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{\beta} + \lambda \right) \right)$ et les valeurs de (λ) et (β) , on peut obtenir l'expression du spectre de l'énergie comme:

$$\beta^2 = \left[\frac{2m_e q Q}{-(n_r + \lambda) 4\pi \epsilon_0 \hbar^2} \right]^2 = - \frac{2m_e E}{\hbar^2} \Rightarrow E_{n_r, m} = - \frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{2m_e q Q}{(n_r + \lambda) 4\pi \epsilon_0 \hbar^2} \right]^2 \quad (\text{III.3.60})$$

On remplace (III.3.33) dans l'expression de E pour obtenir :

$$E_{n_r, m} = - \left[\left(\frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{2m_e q Q} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e}} \right) \left(n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{-E_\theta^{(m)} + \frac{2m_e q D_r}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}} \right) \right]^{-2} \quad (\text{III.3.61})$$

En partant de cette expression, on peut obtenir les solutions du potentiel 2D habituel de Kratzer, en prenant la limite $D_\theta \rightarrow 0$, alors $P_m(D_\theta) \rightarrow 0$ c-à-d $E_\theta^{(m)} = -m^2$ de l'expression (III.3.25), et alors :

$$E_{n_r, m}^{(kratzer)} = - \left[\left(\frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{2m_e q Q} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e}} \right) \left(n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{m^2 + \frac{2m_e q D_r}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}} \right) \right]^{-2} \quad (\text{III.3.62})$$

D'autre part, si on ajoute la limite $D_r \rightarrow 0$ nous obtenons les solutions de coulomb à 2D :

$$E_{n_r, m}^{(coulomb)} = - \left[\left(\frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{2m_e q Q} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e}} \right) \left(n_r + \frac{1}{2} + |m| \right) \right]^{-2} \quad (\text{III.3.63})$$

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

D'après la comparaison avec ces résultats, nous utilisons les notations de l'atome d'hydrogène à 2D où $n = n_r + |m|$, et nous substituons les valeurs propres de l'énergie du système (III.3.23) dans l'expression (III.3.61), nous obtenons :

$$E_{n,m} = - \left[\left(\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{2m_e q Q} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e}} \right) \left(n - |m| + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} c_{2m} \left(\frac{mq}{\pi\epsilon_0\hbar^2} D_\theta \right) + \frac{2m_e q D_r}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}} \right) \right]^{-2} \quad (\text{III.3.64})$$

Maintenant, nous utilisons les mêmes considérations que comme des systèmes moléculaires. Donc, nous choisissons la charge étendue comme un ion positif et la charge ponctuelle est un électron, et nous obtenons deux charges opposées de magnitude $q = -Q = -e$. Nous utilisons les unités atomiques de Hartree où $\hbar = e = m = 4\pi\epsilon_0 = 1$ et les énergies deviennent comme :

$$E_{n,m} = - \left[\left(\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{2m_e q Q} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e}} \right) \left(n - |m| + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} c_{2m} (4D_\theta) + 2D_r} \right) \right]^{-2} \quad (\text{III.3.65})$$

La remarque principale que l'on peut tirer de cette expression, est qu'il existe une condition est très importants pour que le système ait des états liés, qui est :

$$\frac{1}{4} c_{2m} (4D_\theta) + 2D_r \geq 0 \quad (\text{III.3.66})$$

Où, quand $D_r = 0$ dans ce cas le système joue un rôle de système de dipôle non pur [19]. Et pour obtenir l'état $E_{n,m}$, il faut que le moment D_θ ne dépasse pas la valeur critique qui est déterminée par le $E_\theta^{(m)} = 0$, ces valeurs critiques ne dépendent que de m , et sont donc notées $D_{\theta_{criti}}^{(m)}$ (les valeurs du tableau sont données en unité atomique de Rydberg) [19].

m	1	2	3	4	5	6	7
$D_{\theta_{criti}}^{(m)}$	7, 530	24, 547	51, 285	87, 746	133, 930	189, 837	255, 468

TABLEAU III.1 Les valeurs critiques de $D_{\theta_{criti}}^{(m)}$ pour certaines valeurs de m.

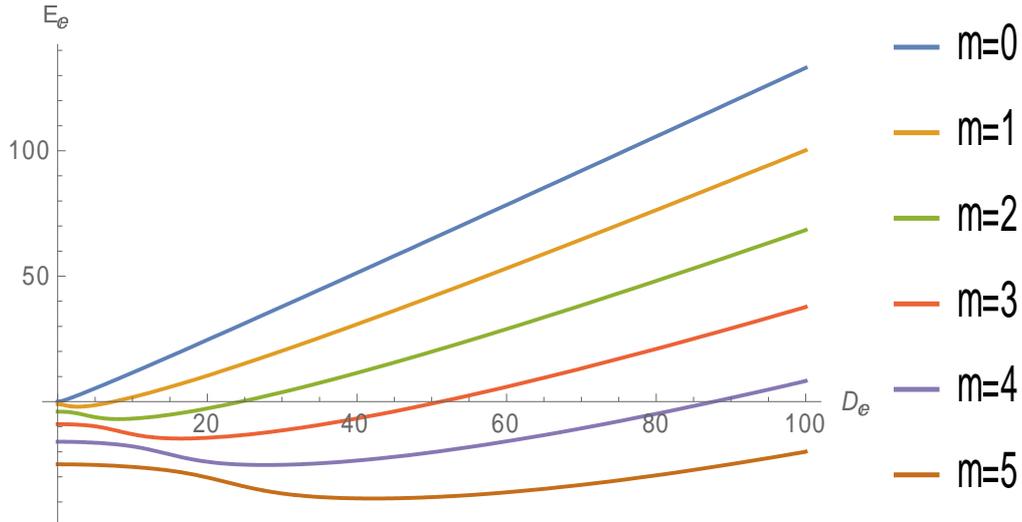


Figure III.3.1 $E_{\theta}^{2m}(D_{\theta})$ pour $m=0, 1, 2, 3, 4$ de bas en haut (en a.u.).

Les énergies montrent qu'elles augmentent avec le moment dipolaire jusqu'à une valeur maximale, puis commencent à diminuer comme nous le voyons sur la figure correspondante :

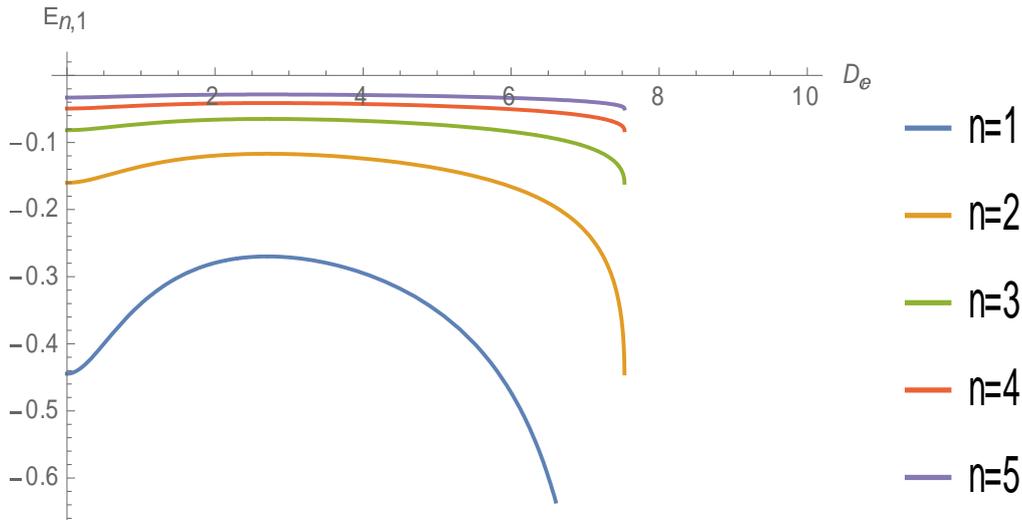


Figure III.3.2 $E_{n,1}$ pour $m = 0, 1, 2, 3, 4$ de bas en haut (en a.u.).

Si $D_r \neq 0$ ici discutons trois cas, qui est :

Donc pour l'état fondamental $m = 0 \Rightarrow E_{\theta}^{(0)} \geq 0 \forall D_{\theta}$, maintenant, on distingue trois cas :

Le premier cas est quand $D_r \leq 0$ c-à-d aucune valeur réelle de l'énergie, cela signifie que les électrons ne peuvent pas être liés dans l'état fondamental et à tout l'état s pour $D_r \leq 0$ comme nous le montrons dans la figure :

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

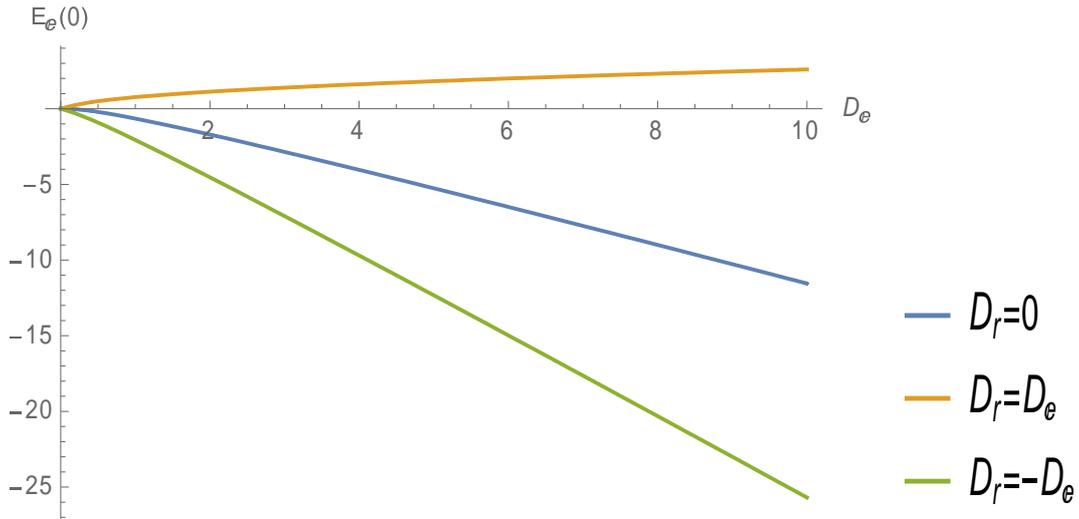


Figure III.3.3 $E_{\theta}^0(D_{\theta})$ pour $(m = 0, D_{\theta} = 0, D_{\theta} = -D_r, D_{\theta} = D_r)$ de bas en haut (en a.u.).

Le second cas quand $m \neq 0$ et $D_r \geq D_{\theta}$ pas de valeur critique pour D_{θ} .

Le troisième cas quand $m \neq 0$ et $D_r < D_{\theta}$ la valeur critique diminue avec D_r .

Nous prenons comme exemple $m = 1$, les valeurs critiques dépendent de ce qui est indiqué dans le tableau, et les résultats de la figure suivant :

$n = 1, m = 1$	$D_{\theta} = 0$	$D_{\theta} = -D_r$	$D_{\theta} = D_r$
valeur critique	7.530	1.047	∞

TABLEAU III.2 Les valeurs critiques de $D_{\theta_{criti}}^{(1)}$ pour certaines valeurs de $(m = 0, D_{\theta} = 0, D_{\theta} = -D_r, D_{\theta} = D_r)$.

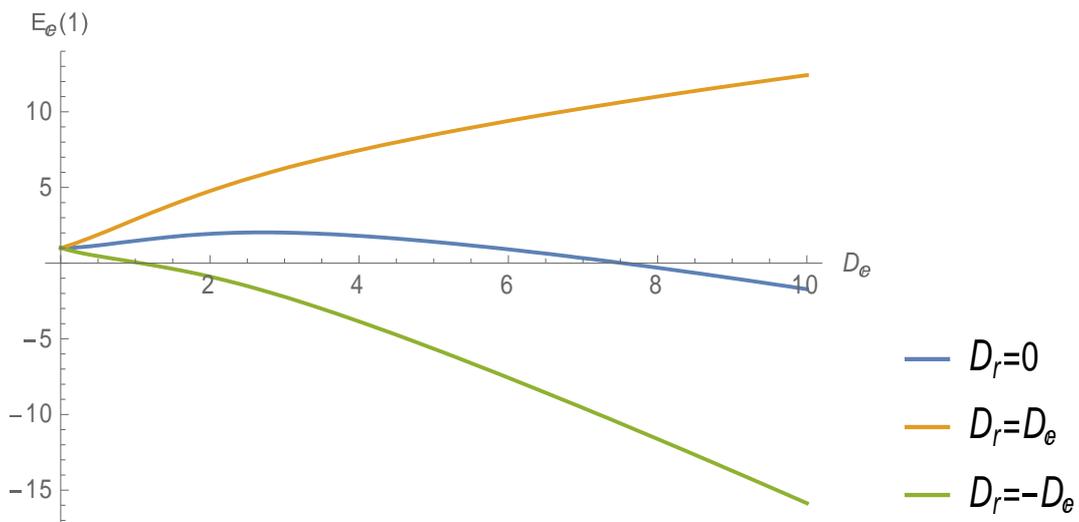


Figure III.3.4 $E_{\theta}^2(D_{\theta})$ pour $(m = 1, D_{\theta} = 0, D_{\theta} = -D_r, D_{\theta} = D_r)$ de bas en haut (en a.u.).

Chapitre III : Solution exacte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel kratzer, colombien et dipôle a deux dimensions

Les énergies montrent qu'elles augmentent avec le moment dipolaire jusqu'à une valeur maximale, puis commencent à diminuer, comme nous le voyons sur la figure suivant :

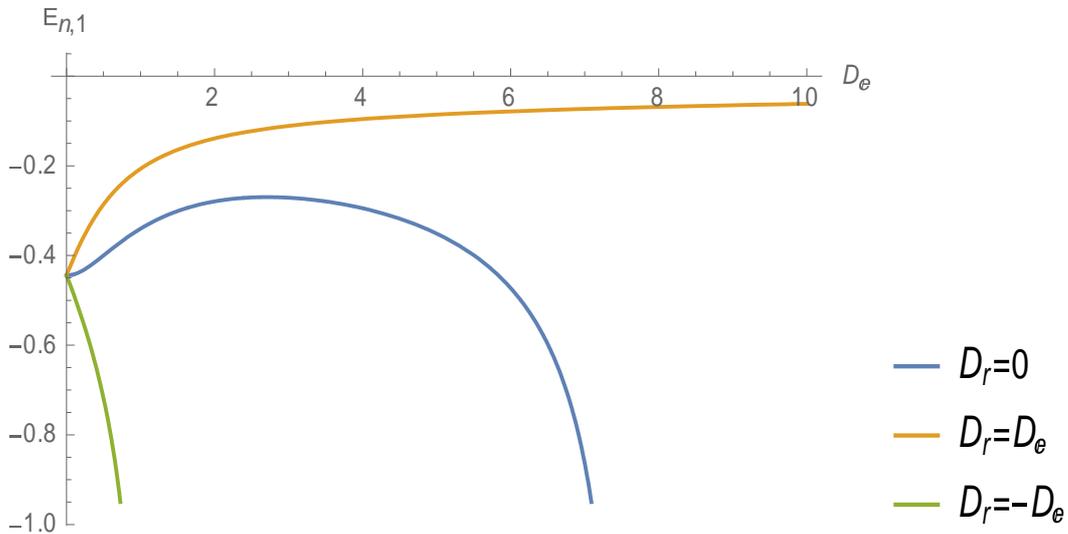


Figure III.3.5 $E_{1,1}(D_\theta)$ pour $(n = 1, m = 1, D_\theta = 0, D_\theta = -D_r, D_\theta = D_r)$ de bas en haut (en a.u.).

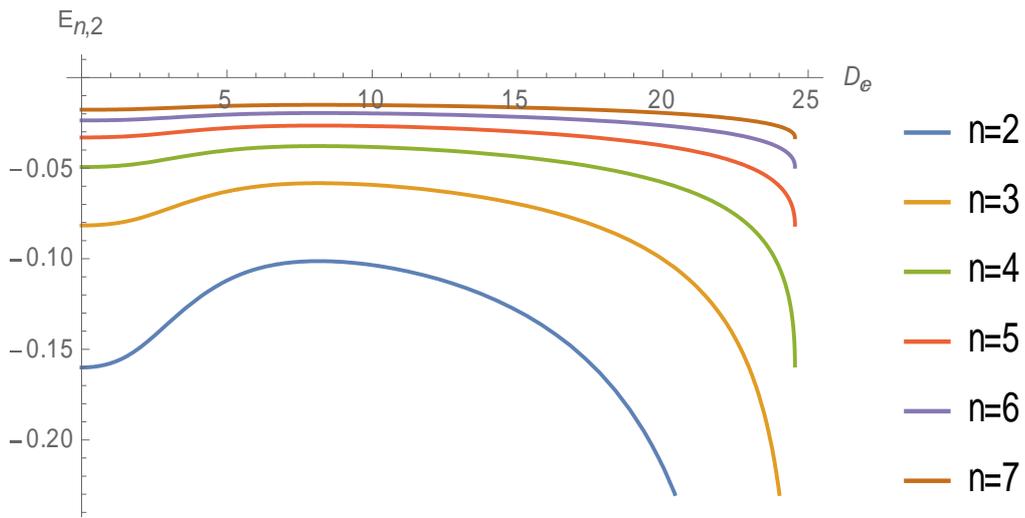
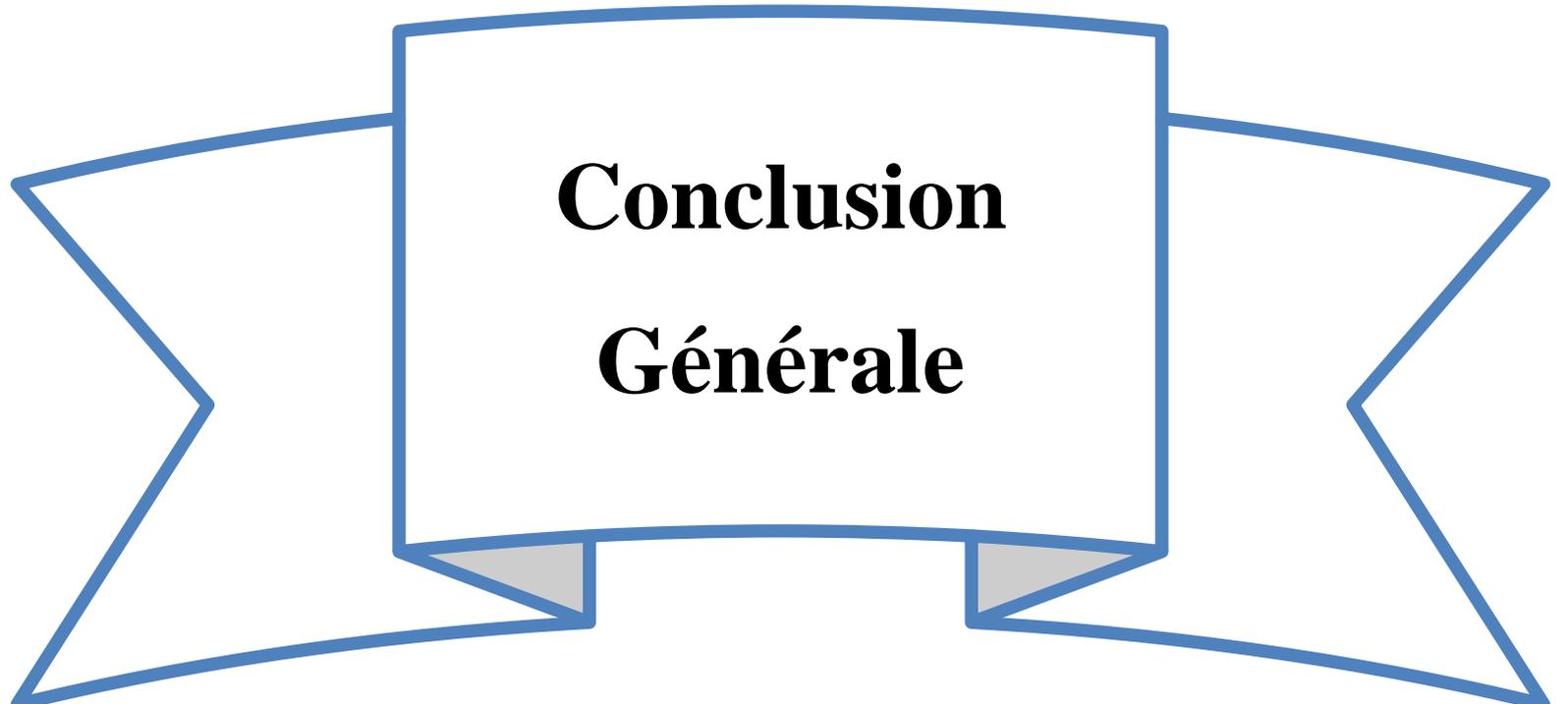


Figure III.3.6 $E_{n,2}(D_\theta)$ pour $(n = 2, 3, 4, 5)$ de bas en haut (en a.u.).



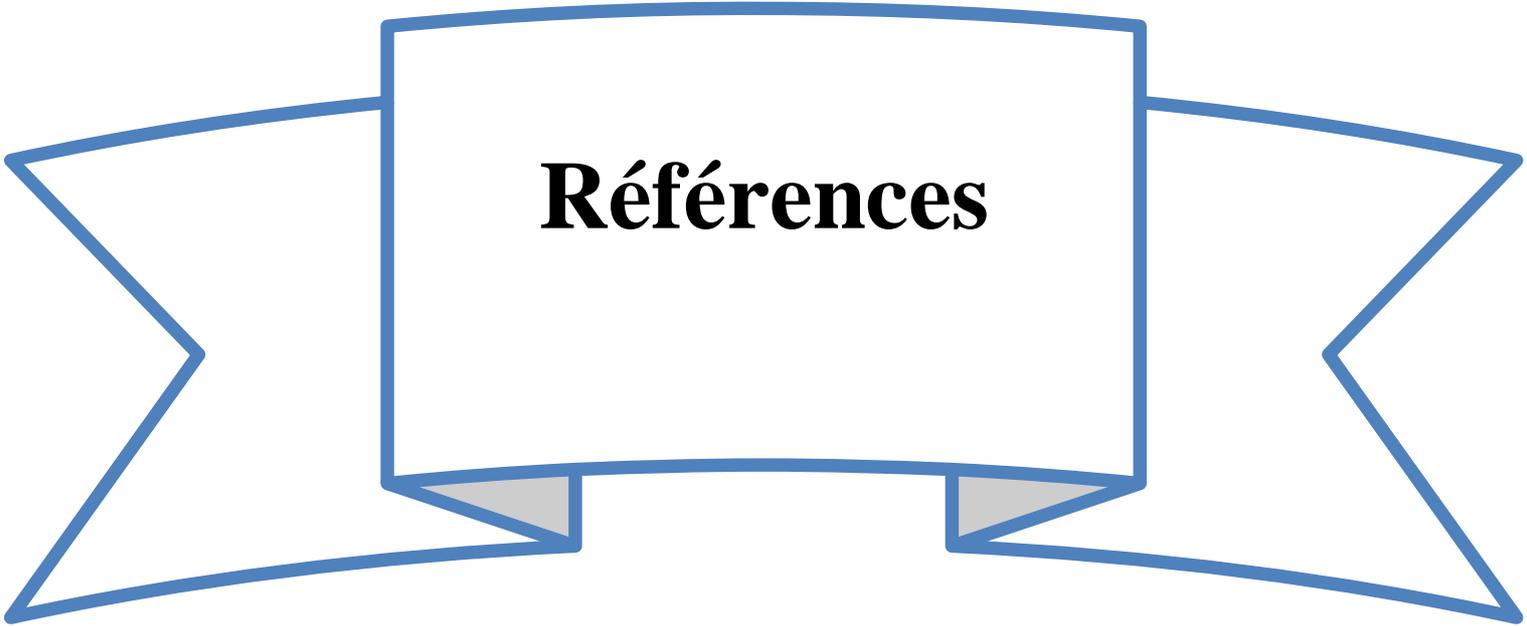
**Conclusion
Générale**

Conclusion Générale

Conclusion Générale :

Dans ce mémoire, après avoir donné un aperçu général sur l'apparition de l'équation de Schrödinger stationnaire dans un potentiel central avec une brève explication pour les potentiels non-centraux, nous avons résolu l'équation de Schrödinger qui décrit la dynamique d'un électron dans un potentiel central de type colombien, kratzer, ensuit le potentiel de Kratzer non central dans l'espace commutatif (ordinaire) pour les systèmes quantiques 2D. En premier lieu, nous avons présenté un traitement quantique mathématique rigoureux de l'équation bidimensionnelle de Schrödinger avec la présence de potentiel central colombienne et kratzer, où le spectre d'énergie et la fonction d'onde correspondante ont été bien déterminés. Dans le dernier chapitre, nous avons étudié analytiquement l'équation de Schrödinger pour le potentiel de terme $V(r, \theta) = \frac{Q}{r} + \frac{D_r}{r^2} + \frac{D \cos \theta}{r^2}$, pour les systèmes 2D nous utilisons la méthode de séparation des variables pour obtenons deux équations, la première équation (angulaire) est une équation de Mathieu, et la deuxième équation (partie radiale) est une équation hypergéométrique lorsque l'énergie du système et la fonction d'onde sont obtenues.

On a l'énergie dépend du moment dipolaire D_θ et le paramètre de kratzer D_r , $E_{n,m} = - \left[\left(\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{2m_e q Q} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e}} \right) \left(n - |m| + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} c_{2m} (4D_\theta) + 2D_r} \right) \right]^{-2}$ avec ce potentiel, nous trouvons que l'influence de potentielle de kratzer sur l'effet dipolaire, dans le cas où $D_r \leq 0$ l'électron ne peut pas être lié à l'état fondamental quelles que soient les valeurs de D_θ , mais quand $m \neq 0$ et $D_r \geq D_\theta$ aucune valeur critique pour D_θ quand $m \neq 0$ et $D_r < D_\theta$ la valeur critique diminue avec D_r .



Références

Référence

- [1] Jean-Louis Basdevant. Jean Dalibard, Mécanique quantique : cours de l'école polytechnique Février 2002.
- [2] J David. Griffiths, Introduction à la mécanique quantique, et édition, Éducation Pearson-Sec 4.1. (2005).
- [3] A. Sinatra, Cours, " introduction à la mécanique quantique", 2008.
- [4] G. Fouad Yacine. Étude des propriétés Structurales, électroniques, optiques et thermodynamiques des poly types Ga_2S_3 , mémoire de magister, université d'Oran des sciences et de la technologie Mohamed Boudiaf, Année de publication (2014).
- [5] S. Hanane. Introduction de la méthode quadratique différentielle généralisée dans le traitement du potentiel coulombien 'écrané', mémoire de magister, université Mohamed Khider -Biskra, 2004.
- [6] J.Mawhin. A.Ronveaux, Schrödinger and Dirac équation for the hydrogen atom and Laguerre polynomuials Archive for the History of exact science 64(2010) 429-460.
- [7] B. Houda. Traitement quantique de certains alcalins et leurs propriétés radiatives à D dimensions, mémoire de master, université Mohamed Khider -Biskra, 2017.
- [8] M.Courbot. [Expression du laplacien en coordonnées polaires \(dimension 2\)](#).
- [9] M.Courbot. [Expression du laplacien en coordonnées polaires \(dimension 3\)](#).
- [10] Chang-Yuan Chen. Cheng-Lin Liu. Fa-Lin Lu, Exact solutions of Schrödinger équation for the Makarov potential, Physics Letters A 374 (2010) 1346–1349.
- [11] Chang-Yuan Chen. Cheng-Lin Liu. Dong-Sheng Sun, The normalized wavefunctions of the Hartmann potential and explicit expressions for their radial average values, Physics Letters A 305 (2002) 341–348.
- [12] A. Durmus, F. Yasuk, J. Chem. Phys. 126, 074108 (2007).
- [13] H.X. Quan, L. Guang, W.Z. Min, N.L. Bin, M. Yan, Commun. Theor. Phys. **53**, 242 (2010).
- [14] Rajendrasinh H. Parmar, Eur. Phys. J. Plus (2019) 134: 86.
- [15] Randell L, Mills. The hydrogen atom revisted, international journal of hydrogen energie v 25 Issue 12, 2000 p : 1171-1183.
- [16] Jhon P. Boyd, C. Rangan, P.H . Bucksbaum pseudospectral method to the hydrogen atom : comparason of the mapped fourrier sine : method with Laguerre series and rational chebyshev expansions journal of computational physics 2003, N of page 19.

- [17] Thomas S., Kuntleman. Construction of the electronic radial wave functions and probability distributions of the hydrogen like systems, department of chemistry, Spring Arbor university, 2006.
- [18] X. L. Yang, S. H. Guo, * and F. T. Chan, K. W. Wong, W. Y. Ching, « Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Non relativistic theory », Physical Review A, vol 43, N 3 (1991).
- [19] S. Connell, Solving the Schrödinger Equation for Hydrogen-Like Atoms, 2004-10-04, http://psi.phys.wits.ac.za/teaching/Connell/phys284/2005/lecture-03/lecture_03/node4.html.
- [20] M. Moumni, M. Falek.-journal of mathematical physics,2016-aip.scitation.org
- [21] M. Heddar, M. Moumni, M. Falek. 1905.03765v2 [quant-ph] 12 May 2019.
- [22] A. D. Alhaidari, Charged particle in the field an electric quadrupole in two dimensions, Physics Department, King Fahd University of Petroleum and Minerals, Dhahran 31261, Saudi Arabia.

Résumé

Dans ce travail, nous étudions les équations d'onde dans un espace euclidien 2D pour un nouveau potentiel non central composé d'un terme de Kratzer et d'un terme dipolaire $V(r, \theta) = \frac{Q}{r} + \frac{D_r}{r^2} + \frac{D_\theta \cos\theta}{r^2}$. Pour l'équation de Schrödinger, nous obtenons les expressions analytiques des énergies et des fonctions d'onde du système. Nous étudions également la dépendance des énergies sur les paramètres D_r et D_θ . Tel que, on trouve D_θ terme tend à dissocier le système, et que le D_r terme peut soit amplifier, soit diminuer cet effet en fonction de son signe.

Mots Clés: Mécanique quantique non relativiste, Équation de Schrödinger, le potentiel de Kratzer, le potentiel non central, le dipôle électrique.

Abstract

In this work, we study the wave equations in 2D euclidean space for a new non-central potential consisting of a Kratzer term and a dipole term $V(r, \theta) = \frac{Q}{r} + \frac{D_r}{r^2} + \frac{D_\theta \cos\theta}{r^2}$. For Schrodinger equation, we obtain the analytical expressions of the energies and the wave functions of the system. We also study the dependence of energies on the parameters D_r and D_θ . We find that the D_θ term tends to dissociate the system, and thus counteracts the Coulomb binding effect, and that the D_r term can either amplify or decrease this effect according to its sign.

Key Words: Non relativistic quantum mechanics, Schrödinger equation, Kratzer potential, the non-central potential, the electric dipole.

ملخص

في هذا العمل ، قمنا بدراسة معادلات الأمواج في الفضاء الإقليدي ثنائي الأبعاد لكمون جديدة غير مركزي يتكون من مركب كل من كمون كراتزر وثنائي القطب والذي يمكن ان نعبر عنه بـ $V(r, \theta) = \frac{Q}{r} + \frac{D_r}{r^2} + \frac{D_\theta \cos\theta}{r^2}$. بالنسبة لمعادلة شرودنجر عند هذا الكمون المعتبر ، سوف نحصل على العبارات التحليلية للطاقة ودوال الموجة لهذا النظام. كما سنقوم بمناقشة تأثيرات كل من D_r و D_θ على الطاقات واعتمادها عليهم. حيث نجد ان D_θ يميل الى فصل النظام اي يؤثر بشكل خاص على تأثير الربط المعروف بـ تأثير كولومب والملاحظة المهمة التي يمكن ان نلاحظها هي ان D_r له دور هام في تضخيم او تقليل هذا التأثير وذلك يتم وفق اشارتها.

كلمات مفتاحية : ميكانيك الكم غير النسبية، معادلة شرودنجر، كمون كراتزر، الكمونات غير مركزية، ثنائي القطب الكهربائي.