



République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Med Khider Biskra

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie

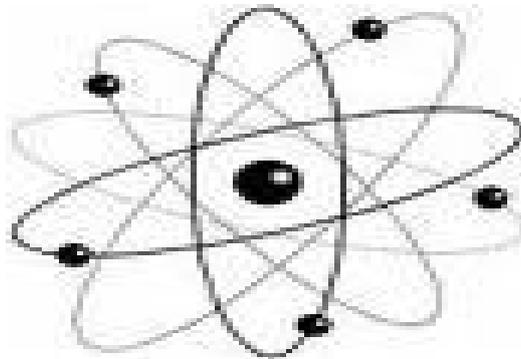


Département des Sciences de la Matière

Domaine des Sciences de la Matière

Filière de Physique

Spécialité Physique des Matériaux



Mémoire de fin d'étude en Master

Intitulé :

**Evaluation des états liés d'un système
quantique au moyen des séries
entières.**

Présenté par:

Melle : Zineb Smaida

Devant le Jury Composé par :

Mr A. Zerarka
Mme N. Bensalah
Mr M. Moumni

Professeur Université Med Khider- Biskra
M.C. « B » Université Med Khider- Biskra
M.C. « A » Université Med Khider - Biskra

Président
Rapporteur
Examineur

Année Universitaire
2013-2014

Dédicaces

Je dédie ce fruit à :

Mes très chers parents qui m'ont apporté
soutien et affection.

Mon très cher mari **Samir**.

Mes très chers frères **Mohamed l'Amine** et **Badr elDine**.

Ma très chère sœur **Sara** ;

à toute ma famille.

Et à toute la promotion 2013/2014.

A tous ceux qui pensent à moi et qui m'aiment.

Zineb Smaida

REMERCIEMENTS

Je remercie tout d'abord "ALLAH" le tout puissant qui ma donné la force et la patience pour mener à bien ce modeste travail.

*J'exprime tout particulièrement une profonde gratitude à ma directrice de mémoire **M^{me} Nedjoua Bensalah** pour avoir suivi et dirigé en toute modestie ce travail et pour ses précieux conseils et ses orientations.*

Mes vifs remerciements vont aux membres de jury pour avoir accepté de faire partie du jury et d'évaluer ce modeste travail;

- *Mr Abd elouhab Zerarka ; professeur à l'université de Biskra,*
- *Mr Mustafa Moumni, maitre de conférences à l'université de Biskra et responsable de la filière « physique ».*

Je ne pourrais pas oublier tout les enseignants à l'université de Mohamed Kheider -Biskra- pour notre éducation et formation. En particulier ceux du département de sciences de la matière pour les efforts consacrés et la formation qui nous ont donnés durant notre cycle d'étude.

Enfin, je remercie aussi toute personne ayant contribué de près ou de loin à l'élaboration de ce travail.

Zineb Smaida

Table des matières

1	Introduction aux séries entières	5
1.1	Définitions	5
1.2	Propriétés	7
1.2.1	Continuité d'une série entière	7
1.2.2	Dérivée d'une série entière	8
1.2.3	Primitive d'une série entière	9
1.3	Propriétés de la somme	9
1.4	Fonctions développables en série entière	10
1.5	Série entière de la variable réelle	13
1.5.1	Propriétés des séries entières réelles	13
1.5.2	Développement en série entière d'une fonction de la variable réelle	13
2	Utilisation des séries entières dans les équations différentielles	15
2.1	Développements en série entière et équations différentielles	15
2.2	Intégration à l'aide de séries entières	15
2.2.1	Intégration d'une équation linéaire à l'aide d'une série entière	15
2.2.2	Développement de la solution en une série entière généralisée	17
3	Introduction à l'équation de Schrödinger	23
3.1	Equation de Schrödinger	23
3.1.1	Equation de Schrödinger stationnaire	24
3.1.2	Equation de Schrödinger dans un système polaire	24

3.1.3	Séparation des variables	26
4	détermination des états liés dans le cas d'un potentiel harmonique	30
4.1	Le potentiel harmonique	30
4.2	Etude analytique	32
4.2.1	Détermination des énergies et des fonctions propres	36
4.2.2	Conclusion :	42

Introduction Générale

L'étude théorique de l'équation de Schrödinger est une théorie phénoménologique qui a joué un rôle extrêmement important dans le développement de la physique quantique. Elle a été formulée pour la première fois par Erwin Schrödinger en 1926 peu de temps après l'invention par Heisenberg de la mécanique des matrices. Ces deux théories furent les premières formulations quantitatives de certains des principes de la mécanique quantique.

Nous allons porter notre attention dans une première étape à la résolution de l'équation de Schrödinger pour une situation physique très simple, à savoir une particule libre ou encore l'interaction ne dépendant que de la position relative des particules les unes par rapport aux autres. Cependant la théorie de Schrödinger est beaucoup plus générale que cela, on peut l'employer pour décrire le mouvement de n'importe quel nombre de particules interagissant entre elles. Donc l'étude d'un système physique consiste essentiellement à résoudre son équation de Schrödinger. Nous allons supposer dans une première phase que l'Hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps, c'est le cas des systèmes conservatifs, qui correspond aux systèmes classiques dont l'énergie est une constante du mouvement. Nous formulons l'équation de Schrödinger et nous discutons ses principales propriétés, et comment elle peut déterminer les niveaux d'énergie des états stationnaires. En particulier, cette équation aux valeurs propres intervient directement dans les deux problèmes les plus fréquents en physique quantique, à savoir :

- La détermination des niveaux d'énergie des états liés ;
- Celle des états de diffusion, relatifs aux processus des états non liés.

En ce qui nous concerne nous allons aborder dans ce travail, le premier problème qui concerne les états liés. Cependant, les propriétés symétriques que peut posséder l'Hamiltonien peuvent en faciliter la résolution. Il peut se faire notamment qu'un changement de variable approprié conduise à une équation aux dérivées partielles dont les variables se séparent, donc plus simples.

C'est ce qui se passe pour une particule dans un potentiel central, c'est à dire qui ne dépend que de la distance r de la particule à un centre de forces. La résolution de l'équation de

Schrödinger se réduit après séparation des variables angulaire à celle d'une équation différentielle concernant la variable radiale seulement, équation qu'il est toujours possible d'intégrer analytiquement ou numériquement, et c'est le but recherché.

En suivant cette idée pour résoudre l'équation de Schrödinger pour un potentiel bien précis, on suit l'enchaînement suivant, en commençant tout d'abord par un premier chapitre qui présente une introduction aux séries entières, qui est la méthode choisie dans notre travail.

Puis dans un deuxième chapitre nous allons montrer brièvement l'utilisation de ces séries dans les équations différentielles.

Le chapitre III sera une introduction à l'équation de Schrödinger, où nous allons parler des propriétés symétriques de l'Hamiltonien, pour arriver à une équation de Schrödinger radiale.

Nous consacrons le dernier chapitre aux systèmes de potentiel du type : $V(r) = ar^2$, qui décrit le potentiel harmonique.

Le chapitre IV consiste dans la représentation de la solution cherchée sous forme d'une série entière, pour obtenir les solutions exactes de l'équation de Schrödinger.

On y présente graphiquement quelques exemples des fonctions d'ondes établies, selon le développement de la série de l'état approprié, qui ont pour but d'illustrer les résultats discutés par cette méthode.

On clôture ce travail par une conclusion.

Chapitre 1

Introduction aux séries entières

1.1 Définitions

Les fonctions dites “analytiques” sont des fonctions qui ont des propriétés encore meilleures que celles des fonctions différentiables. Rappelons que les fonctions différentiables admettent une approximation, en un point x_0 donné, par une fonction polynomiale : c’est la fameuse formule de Taylor

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{1}{2}f''(x_0)h^2 + \dots + \frac{1}{k!}f^{(k)}(x_0)h^k + R_k(x_0, h).$$

Le point essentiel du théorème de Taylor est de fournir un bon contrôle du “terme reste” $R_k(x_0, h)$ (que l’on peut écrire sous forme d’une intégrale, ou sous d’autres formes). En calcul différentiel, on s’intéresse principalement au comportement de ce terme quand h tend vers 0 : sa contribution (pour k fixé) est négligeable envers les autres termes qui sont polynomiales en h , ainsi f est approchée, au voisinage de x_0 , par le polynôme

$$p(h) = a_0 + a_1h + a_2h^2 + \dots + a_kh^k, \quad \text{avec } a_i = \frac{1}{i!}f^{(i)}(x_0).$$

Une autre question importante concerne le comportement du terme reste quand k tend vers l’infini (et h et x_0 restent fixés). Les fonctions analytiques sont précisément celles pour lesquelles le terme reste tend vers 0 :

Definition 1 Une fonction $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ définie sur un intervalle I est dite analytique si elle est de classe C^∞ et si, pour tout $x_0 \in I$, et pour tout h dans un voisinage de 0, on a

$$\lim_{k \rightarrow \infty} R_k(x_0, h) = 0.$$

On écrit alors $f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i (x - x_0)^i$ (avec $a_i = \frac{1}{i!} f^{(i)}(x_0)$), pour x au voisinage de x_0 . Cette dernière écriture suggère un autre point de vue :

Definition 2 Une série entière convergente est la donnée d'une suite a_0, a_1, \dots telle que, pour tout x dans un voisinage de 0, la limite suivante existe

$$\sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j = \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^k a_j x^j.$$

Un avantage de cette définition est qu'elle a un sens tout aussi bien pour les nombres complexes que réelles. On peut alors démontrer l'équivalence suivante :

Théorème : Pour une fonction $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ sont équivalents :

- (1) f est analytique ;
- (2) pour tout $x_0 \in I$, il existe une série entière convergente telle que, au voisinage de x_0 ,

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j (x - x_0)^j.$$

Comme dit ci-dessus, l'avantage de la formulation (2) est qu'elle a un sens aussi bien pour une fonction $f : U \rightarrow \mathbb{C}$ définie sur un ouvert U de \mathbb{C} . On dit alors que f est (complexe) analytique.

Example : Supposons qu'il existe une fonction analytique telle que $f' = f$ et $f(0) = 1$. Alors, par récurrence, on a $f^{(k)} = f$ pour tout k , et donc les coefficients de Taylor de f au point $x_0 = 0$ sont $a_k = \frac{1}{k!} f^{(k)}(0) = \frac{1}{k!}$, et ainsi f est donnée par la série entière

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} x^j.$$

Nous allons montrer que cette formule définit en effet une fonction analytique, la fonction exponentielle – c’est la fonction la plus importante en mathématiques. De façon similaire on étudiera d’autres fonctions élémentaires. Voici une liste de telles fonctions et de leurs séries entières [1] :

$$\begin{aligned} \exp(x) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} x^j \\ \sin(x) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j+1)!} x^{2j+1} \\ \cos(x) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j)!} x^{2j} \\ sh(x) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j+1)!} x^{2j+1} \\ ch(x) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j)!} x^{2j} \\ \log(1+x) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j+1} x^{j+1} = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - + \dots \\ (1+x)^\alpha &= \sum_{j=0}^{\infty} \binom{\alpha}{j} x^j \quad \text{où} \quad \binom{\alpha}{j} = \frac{\alpha(\alpha-1)\dots(\alpha-j+1)}{j!} \end{aligned}$$

1.2 Propriétés

Ce paragraphe étudie les propriétés de continuité, de dérivabilité et d’intégrabilité de la fonction somme des séries entières.

1.2.1 Continuité d’une série entière

Proposition : Soit $(\sum a_n x^n)$ une série entière de rayon de convergence R et soit

$f :]-R, R[\rightarrow \mathbb{R}$ la fonction définie par $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$, f est alors continue.

Preuve : Soit $0 < r < R$. Pour tout $n \in \mathbb{N}$, les fonctions $f_n(x) = a_n x^n$ sont continues dans $[-R, R]$ et puisque la convergence est normale donc uniforme dans $[-r, r]$, f est alors continue dans $[-r, r]$ pour tout r , $0 < r < R$ donc continue dans $]-R, R[$.

1.2.2 Dérivée d'une série entière

Definition 3 Une fonction $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ est dite dérivable en $x_0 \in \mathbb{R}$ si $\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$ existe. On la note $f'(x_0)$.

Definition 4 Une fonction f est dite de classe C^n sur un intervalle I de \mathbb{R} , si sa dérivée d'ordre n est une fonction continue sur I . On notera alors que $f \in C^n(I)$.

Si elle est indéfiniment (ou infiniment) dérivable, on dira alors qu'elle est de classe C -infinie et on écrira que $f \in C^\infty(I)$.

Par contre $f \in C^n(I)$, signifie que f est seulement continue sur I .

Proposition : Soit $(\sum a_n x^n)$ une série entière de rayon de convergence R , et soit $f :] - R, R[\rightarrow \mathbb{R}$ la fonction définie par

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$$

Alors f est dérivable et on a

$$f'(x) = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n x^{n-1}.$$

Corollaire : Soit la série $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$ de rayon de convergence R ; f est indéfiniment dérivable ($f \in C^\infty(] - R, R[)$); et l'on a :

$$\forall x \in] - R, R[, \quad f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}}{n!} x^n.$$

Preuve : En effet, si $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$, par application de la proposition précédente on a

$f'(x) = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n x^{n-1}$, et par récurrence, la dérivée d'ordre k est donnée par la relation :

$$f^{(k)}(x) = \sum_{n=k}^{\infty} n(n-1)(n-2)\dots(n-k+1) a_n x^{n-k}.$$

De cette expression, il résulte que $f^{(k)}(0) = a_k k!$; c'est-à-dire que $a_k = \frac{f^{(k)}(0)}{k!}$.

1.2.3 Primitive d'une série entière

Definition 5 Une fonction $f : D \mapsto \mathbb{R}$ admet une primitive s'il existe une fonction $F : D \mapsto \mathbb{R}$ vérifiant $F' = f$; (D étant le domaine de définition de f).

Proposition : Soit $(\sum a_n x^n)$ une série entière de rayon de convergence R et soit $f :]-R, R[\mapsto \mathbb{R}$ la fonction définie par $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$. On considère la fonction $F :]-R, R[\mapsto \mathbb{R}$ définie par $F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n+1} x^{n+1}$. Alors $F'(x) = f(x) \forall x \in]-R, R[$.

Preuve : Le rayon de convergence de la série entière $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n+1} x^{n+1}$ est R car $\lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{\frac{a_{n+1}}{n+2} \frac{n+1}{a_n}}{\frac{a_n}{n+1}} \right| = \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{n+1}}{a_n} \right| = \frac{1}{R}$. D'après le théorème précédent on conclut que $F' = f$.

Remark : Dans le cas réel, si $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$, avec $a_n \in \mathbb{R}$ et $x \in]-R, R[$,
 $\int_0^x f(t) dt = \int_0^x \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n t^n \right) dt = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \int_0^x t^n dt = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n+1} x^{n+1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_{n-1}}{n} x^n$
 pour tout $x \in]-R, R[$.

1.3 Propriétés de la somme

Les résultats de cette section ont de nombreuses conséquences pratiques sur les calculs de sommes de séries entières. Nous examinons le comportement des séries par rapport aux opérations habituelles (combinaisons linéaires et produit).

Theorem : Soient $\sum a_n z^n$ et $\sum b_n z^n$ deux séries entières, de rayons de convergence respectifs R_a et R_b . Pour tout complexe z tel que $|z| < \min\{R_a, R_b\}$, on a [2] :

1.

$$\alpha \sum_{n=0}^{+\infty} a_n z^n + \beta \sum_{n=0}^{+\infty} b_n z^n = \sum_{n=0}^{+\infty} (\alpha a_n + \beta b_n) z^n.$$

pour tous complexes α et β .

2.

$$\left(\sum_{n=0}^{+\infty} a_n z^n \right) \left(\sum_{n=0}^{+\infty} b_n z^n \right) = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n z^n,$$

où pour tout $n \geq 0$,

$$c_n = \sum_{h+k=n} a_h b_k = a_0 b_n + a_1 b_{n-1} + \dots + a_{n-1} b_1 + a_n b_0.$$

1.4 Fonctions développables en série entière

Si $\sum a_n z^n$ est une série entière de domaine de convergence D , on définit une fonction sur D en posant :

$$\forall z \in D, f(z) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n z^n$$

et on rappelle que, dans le cas où le rayon de convergence R de cette série entière est non nul, D contient le disque ouvert $D(0, R)$ de centre 0 et de rayon R .

Réciproquement, on s'intéresse ici aux fonctions définies sur un voisinage ouvert de 0 dans le plan complexe qui peuvent s'écrire comme somme d'une série entière.

Definition 6 *On dit qu'une fonction f définie sur un disque ouvert $D(0, \alpha)$ de centre 0 et de rayon $\alpha > 0$ du plan complexe est développable en série entière au voisinage de 0 s'il existe une série entière $\sum a_n z^n$ et un réel $r \in]0, \alpha]$ tels que :*

$$\forall z \in D(0, r), f(z) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n z^n$$

Dans un premier temps, on constate que si une fonction est développable en série entière sur un disque ouvert $D(0, r)$ elle est alors continue sur ce disque. En réalité elle est même indéfiniment dérivable.

Theorem : Une fonction f développable en série entière sur un disque ouvert $D(0, r)$ du plan complexe est continue sur ce disque.

Theorem : Si une fonction est développable en série entière au voisinage de 0, alors ce développement est uniquement déterminé.

Corollaire : Si une fonction paire [resp. impaire] f est développable en série entière au voisinage de 0, alors ce développement est nécessairement de la forme :

$$f(z) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_{2n} z^{2n}$$

[resp. :

$$f(z) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_{2n+1} z^{2n+1}]$$

Pour la suite de ce paragraphe, on se limite aux séries entières et fonctions de la variable réelle, les coefficients des séries entières considérées pouvant être complexes.

Dans le cas où une série entière réelle $\sum a_n x^n$ de rayon de convergence fini $R > 0$ converge pour $x = R$, on peut la prolonger par continuité en R . La démonstration de ce résultat se fait en utilisant une transformation d'Abel.

Theorem : (Abel) Soit $\sum a_n x^n$ une série entière réelle de rayon de convergence fini $R > 0$ telle que la série $\sum a_n R^n$ soit convergente. En notant $f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n x^n$ pour $x \in]-R, R[$, on a :

$$\lim_{x \rightarrow R^-} f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n R^n$$

et f peut être prolongée par continuité en R en posant $f(R) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n R^n$.

Theorem : Soit f une fonction de la variable réelle développable en série entière sur un intervalle $] -r, r[$ où $r > 0$ avec :

$$\forall x \in] -r, r[, f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n x^n$$

où $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est une suite de nombres complexes. La fonction f est alors continûment dérivable sur $] - r, r[$ avec :

$$\forall x \in] - r, r[, f'(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} n a_n x^{n-1}$$

Corollaire : Soit f une fonction de la variable réelle développable en série entière sur un intervalle $] - r, r[$ où $r > 0$ avec :

$$\forall x \in] - r, r[, f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n x^n$$

où $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est une suite de nombres complexes. La fonction f est alors indéfiniment dérivable sur $] - r, r[$ avec, pour tout entier $p \geq 1$ et tout réel $x \in] - r, r[$:

$$f^{(p)}(x) = \sum_{n=p}^{+\infty} n(n-1) \dots (n-p+1) a_n x^{n-p} = \sum_{n=p}^{+\infty} \frac{n!}{(n-p)!} a_n x^{n-p}.$$

En évaluant $f^{(p)}$ en 0, on retrouve l'unicité du développement en série entière de la fonction f avec :

$$\forall n \in \mathbb{N}, a_n = \frac{f^{(n)}(0)}{n!}.$$

Le théorème précédent nous permet également de donner le développement en série entière de la primitive nulle en 0 d'une fonction développable en série entière.

Corollaire : Soit f une fonction de la variable réelle développable en série entière sur un intervalle $] - r, r[$ où $r > 0$ avec :

$$\forall x \in] - r, r[, f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n x^n$$

où $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est une suite de nombres complexes. La primitive de f nulle en 0 est la fonction F définie par :

$$\forall x \in] - r, r[, F(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{a_n}{n+1} x^{n+1}.$$

1.5 Série entière de la variable réelle

1.5.1 Propriétés des séries entières réelles

Definition 7 On appelle série entière de la variable réelle (ou série entière réelle) toute série d'applications de \mathbb{R} dans \mathbb{R} de terme général $f_n : x \in \mathbb{R} \mapsto a_n x^n$ où $a_n \in \mathbb{R}$. Pour tout $n \in \mathbb{N}$, le réel a_n est appelé coefficient d'ordre n de la série entière.

Les différentes propriétés de convergence d'une série entière réelle de rayon de convergence R non nul sont les suivantes.

- La série entière converge simplement et absolument sur $] - R, R[$.
- La série entière diverge grossièrement sur $] - \infty, -R[$ et sur $]R, +\infty[$.
- En R et en $-R$ la série entière peut selon les cas converger ou diverger ; une étude spécifique est requise.
- Quelque soit le réel r avec $0 < r < R$, la série entière converge normalement et uniformément sur l'intervalle $[-r, r]$.

1.5.2 Développement en série entière d'une fonction de la variable réelle

Definition 8 Soit f une fonction réelle de la variable réelle définie dans un voisinage de 0. On dit que f est développable en série entière autour de 0 s'il existe une série entière réelle de rayon de convergence R non nul et un réel strictement positif r tel que :

$$\forall x \in] - r, r[\quad f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n x^n.$$

Proposition : (Série de Mac-Laurin) Soit f une fonction réelle de la variable réelle développable en série entière autour de 0. Alors il existe un réel $r > 0$ tel que f soit de classe C^∞ sur $] - r, r[$ et :

$$\forall x \in] - r, r[\quad f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) x^n.$$

Attention : Toute fonction réelle de la variable réelle développable en série entière sur un intervalle $] -r, r[$, $r \in \mathbb{R}_+^*$ est de classe C^∞ sur cet intervalle. Mais la réciproque est fautive : il existe des fonctions de classe C^∞ sur un voisinage de 0 qui ne sont pas développables en série entière autour de 0.

C'est le cas de l'application f définie sur \mathbb{R} par :

$f(x) = \exp\left(-\frac{1}{x^2}\right)$ si $x \neq 0$ et $f(0) = 0$ qui est de classe C^∞ sur \mathbb{R} et pour laquelle la série de Mac-Laurin de f est la série nulle.

A quelle condition une fonction réelle de la variable réelle est-elle développable en série entière autour de 0 ?

Proposition : Soient r un réel strictement positif et f une fonction réelle de la variable réelle de classe C^∞ sur $] -r, r[$. Si f a toutes ses dérivées bornées sur $] -r, r[$, i.e. si :

$$\exists M \in \mathbb{R}_+ \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad \forall x \in] -r, r[\quad \left| f^{(n)}(x) \right| \leq M$$

alors f est développable en série entière autour de $] -r, r[$ et cette série entière est la série de Mac-laurin [3].

Chapitre 2

Utilisation des séries entières dans les équations différentielles

2.1 Développements en série entière et équations différentielles

Dans certaines situations, on peut :

- 1) expliciter la somme d'une série entière ou développer une fonction en série entière à l'aide d'une équation différentielle.
- 2) on peut résoudre des équations différentielles avec des développements en séries entières [4].

2.2 Intégration à l'aide de séries entières

2.2.1 Intégration d'une équation linéaire à l'aide d'une série entière

Le plus employé des procédés pour obtenir les solutions d'une équation linéaire à coefficients variables, consiste dans la représentation de la solution cherchée sous forme d'une série entière. Ce procédé est particulièrement commode quand on l'utilise pour des équations différentielles linéaires.

On prendra l'exemple à étudier les équations du second ordre :

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = 0 \quad (2.1)$$

on suppose que les coefficients $p(x)$ et $q(x)$ apparaissent sous forme de séries ordonnées suivant les puissances entières positives de x , de sorte que l'équation se présente sous forme :

$$y'' + (a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots)y' + (b_0 + b_1x + b_2x^2 + \dots)y = 0 \quad (2.2)$$

on choisit le coefficient de y'' égal à l'unité.

On cherche alors la solution de l'équation (2.2) sous forme d'une série entière :

$$y = \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s x^s \quad (2.3)$$

en introduisant cette expression de y et ses dérivées dans l'équation (2.2), on obtient :

$$\sum_{s=0}^{\infty} s(s-1)\alpha_s x^{s-2} + \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s x^s \sum_{s=0}^{\infty} s\alpha_s x^{s-1} + \sum_{s=0}^{\infty} b_s x^s \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s x^s = 0$$

en multipliant les séries entières, en rassemblant les termes semblables et en annulant les coefficients des différents puissances de x dans le premier membre de l'équation écrite, on obtient une suite d'équation algébriques :

$$\left\{ \begin{array}{l} 2.1\alpha_2 + a_0\alpha_1 + b_0\alpha_0 = 0, \\ 3.2\alpha_3 + 2a_0\alpha_2 + a_1\alpha_1 + b_0\alpha_1 + b_1\alpha_0 = 0, \\ 4.3\alpha_4 + 3a_0\alpha_3 + 2a_1\alpha_2 + a_2\alpha_1 + b_0\alpha_2 + b_1\alpha_1 + b_2\alpha_0 = 0, \\ \dots\dots\dots \\ (s+2)(s+1)\alpha_{s+2} + Q_s(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{s+1}) = 0, \\ \dots\dots\dots \end{array} \right. \quad (2.4)$$

On désignera par Q_s le polynôme homogène du premier degré des arguments $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{s+1}$. Les coefficients α_0 et α_1 restent quelconques et jouent le rôle de constantes arbitraires.

La première des équations (2.4) donne α_2 , la seconde donne α_3 , la troisième donne α_4 , etc., et à partir de l'équation de rang $(s + 1)$ on peut déterminer α_{s+2} , connaissant les précédents $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{s+1}$.

On détermine par le procédé ci-dessus deux solutions y_1 et y_2 , et pour la première solution on prend $\alpha_0 = 1$ et $\alpha_1 = 0$ et pour la seconde $\alpha_0 = 0$ et $\alpha_1 = 1$, ce qui est équivalent aux conditions initiales :

$$\begin{aligned}y_1|_{x=0} &= 1, & y_1'|_{x=0} &= 0, \\y_2|_{x=0} &= 0, & y_2'|_{x=0} &= 1.\end{aligned}$$

Donc chaque solution de l'équation sera une combinaison linéaire de ses solutions et si les conditions initiales sont de la forme :

$$y|_{x=0} = A, \quad y'|_{x=0} = B,$$

alors :

$$y = Ay_1 + By_2.$$

Tout ce qui a été dit plus haut s'applique aussi évidemment aux équations linéaires d'ordre plus élevé que 2. Seulement dans ce cas, lors de la recherche de la solution sous forme d'une série entière, ce ne sont pas les deux premiers coefficients qui restent indéterminé, mais les s premiers coefficients si l'équation est d'ordre s [5].

2.2.2 Développement de la solution en une série entière généralisée

Dans les applications, on rencontre un nombre important d'équations de la forme :

$$x^2 y'' + p(x) xy' + q(x) y = 0,$$

où $p(x)$ et $q(x)$ sont comme dans l'équation (2.2), des polynômes. Compte tenu de la présence du facteur x^2 devant la dérivée seconde, l'équation citée n'est pas du type (2.2).

On cherchera la solution de l'équation non plus sous forme d'une simple série entière (2.3), mais sous forme du produit d'une certaine puissance de x par une telle série :

$$y = x^\rho \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s x^s \tag{2.5}$$

les expressions de y , y' , et y'' se déterminent ainsi :

$$y = \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s x^{s+\rho}, \quad y' = \sum_{s=0}^{\infty} (\rho + s) \alpha_s x^{s+\rho-1},$$

$$y'' = \sum_{s=0}^{\infty} (\rho + s) (\rho + s - 1) \alpha_s x^{s+\rho-2}.$$

Après avoir réuni les termes semblables et annulé les coefficients des différentes puissances de x , on obtient une suite d'équations algébriques :

$$\left\{ \begin{array}{l} [\rho(\rho - 1) + a_0\rho + b_0] \alpha_0 = 0, \\ [(\rho + 1)\rho + a_0(\rho + 1) + b_0] \alpha_1 + a_1\rho\alpha_0 + b_1\alpha_0 = 0, \\ [(\rho + 2)(\rho + 1) + a_0(\rho + 2) + b_0] \alpha_2 + a_1(\rho + 1)\alpha_1 + a_2\rho\alpha_0 + b_1\alpha_1 + b_2\alpha_0 = 0, \\ \dots\dots\dots \\ [(\rho + s)(\rho + s - 1) + a_0(\rho + s) + b_0] \alpha_s + Q_s(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{s-1}) = 0, \\ \dots\dots\dots \end{array} \right. \tag{2.6}$$

On désignera par $Q_s(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{s-1})$ un polynôme homogène du premier degré par rapport à $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{s-1}$.

Comme par hypothèse $\alpha_0 \neq 0$, la première de ces équations citées donne une équation du second degré permettant de déterminer l'exposant ρ :

$$F(\rho) = \rho(\rho - 1) + a_0\rho + b_0 = 0 \quad (2.7)$$

c'est l'équation déterminante. Soit ρ_1 et ρ_2 ses racines. En supposant que dans les équations (2.6).

$\rho = \rho_1$ ou $\rho = \rho_2$, on obtient une suite d'équations qui a chacune un coefficient α_s de plus que la précédente et on peut ainsi déterminer successivement $\alpha_1, \alpha_2, \dots$. Le coefficient α_0 reste arbitraire et joue le rôle d'un facteur arbitraire. On peut poser, par exemple, $\alpha_0 = 1$.

Après avoir posé $\rho = \rho_1$ ou $\rho = \rho_2$, la première des équations (2.6) devient une identité, la deuxième donne α_1 , la troisième α_2 , etc., et la $(s + 1)^e$ donne α_s , si $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{s-1}$ sont déjà connus. Pour cela il faut simplement que le coefficient de α_s dans cette équation soit différent de zéro.

On suppose que la solution (2.5) est obtenue à l'aide de la racine de l'équation (2.7) $\rho = \rho_2$. Si $F(\rho_2 + s) \neq 0$, quel que soit l'entier positif s , la méthode de calcul des coefficients α_s indiquée ci-dessus est utilisable et donne des valeurs déterminées pour ces coefficients.

Selon la différence des racines $(\rho_1 - \rho_2)$ on en déduit que :

- si $(\rho_1 - \rho_2) \neq k$ où k est un entier positif différent de zéro, on peut utiliser les deux racines de l'équation (2.7) et obtenir par la méthode expliquée plus haut deux solutions de la forme :

$$y_1 = x^{\rho_1} \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s x^s, \quad y_2 = x^{\rho_2} \sum_{s=0}^{\infty} \beta_s x^s \quad (\alpha_0 \text{ et } \beta_0 \neq 0); \quad (2.8)$$

- si $(\rho_1 - \rho_2) = k$ où k est un entier positif différent de zéro, on peut obtenir à l'aide de la méthode indiquée plus haut, d'une façon générale, une seule série :

$$y_1 = x^{\rho_1} \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s x^s \quad (2.9)$$

• si $(\rho_1 - \rho_2) = 0$, l'équation (2.7) a une racine double $\rho_1 = \rho_2$, on ne peut obtenir là encore qu'une seule série (2.9).

Exemple : On considère l'équation différentielle :

$$(E) : 4xy'' + 2y' + y = 0$$

Admet-elle des solutions développables en série entière sur un intervalle $] - a, a[$?

Soit $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$ somme d'une série entière de rayon de convergence $R > 0$.

Pour $x \in] - R, R[$, on a :

$$f'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) a_{n+1} x^n$$

$$f''(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} x^n$$

f est solution de (E) sur $] - a, a[$ avec $a < R$ et si pour tout $x \in] - a, a[$, on a :

$$\underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} 4(n+2)(n+1) a_{n+2} x^{n+1}}_{4x f''(x)} + \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} 2(n+1) a_{n+1} x^n}_{2f'(x)} + \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n}_{f(x)} = 0$$

On regroupe suivant le degré des monômes. Pour cela on regarde :

$$\sum_{n=0}^{\infty} 4(n+2)(n+1) a_{n+2} x^{n+1} = \sum_{m=0}^{\infty} 4(m+1) m a_{m+1} x^m$$

On obtient la condition :

$$\forall x \in] - a, a[\quad 2a_1 + a_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (4(m+1) m a_{m+1} + 2(m+1) a_{m+1} + a_m) x^m = 0$$

$$\Leftrightarrow 2a_1 + a_0 \sum_{m=1}^{\infty} ((2m+2)(2m+1)a_{m+1} + a_m)x^m = 0$$

D'après le principe d'unicité du développement en série entière, cette condition équivaut à :

$$\begin{cases} 2a_1 + a_0 = 0 \\ (2m+2)(2m+1)a_{m+1} + a_m = 0 \text{ pour tout } m \geq 1 \end{cases}$$

On obtient la relation de récurrence :

$$a_{m+1} = -\frac{1}{(2m+2)(2m+1)}a_m \quad \forall m \geq 0$$

On peut en déduire une expression explicite des a_m en fonction de a_0 :

$$a_1 = -\frac{1}{2}a_0 \quad a_2 = \frac{1}{24}a_0$$

Par récurrence immédiate, on trouve :

$$a_m = \frac{(-1)^m a_0}{(2m)!} \text{ pour tout } m \geq 0$$

On détermine le rayon de convergence de la série $\sum_{m \geq 0} a_m x^m$ obtenue.

- si $a_0 = 0$, la série est nulle et elle converge en tout point. Le rayon est donc infini.
- si $a_0 \neq 0$, la série n'est pas nulle car $a_n \neq 0, \forall n$ et on a :

$$\frac{|a_{m+1}x^{m+1}|}{|a_m x^m|} = \frac{|x|}{(2m+1)(2m+2)} \xrightarrow{m \rightarrow \infty} 0$$

Le rayon de convergence est donc infini. Finalement, l'équation (E) admet pour solutions développables en série entières les fonctions :

$$x \mapsto a_0 \varphi(x)$$

avec :

$$\varphi(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2m)!} x^m, \quad a_0 \in \mathbb{R}$$

Ce sont des solutions sur \mathbb{R} tout entier. On peut donner une solution explicite à l'équation différentielle (E) :

Pour $x \in \mathbb{R}^+$, on pose $x = t^2$:

$$\varphi(x) = \varphi(t^2) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2m)!} t^{2m} = \cos(t) = \cos(\sqrt{x})$$

Pour $x \in \mathbb{R}^-$, on pose $x = -t^2$:

$$\varphi(x) = \varphi(-t^2) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m (-t)^{2m}}{(2m)!} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m)!} t^{2m} = \cosh(t) = \cosh(-\sqrt{x})$$

Finalement :

$$\varphi(x) = \begin{cases} \cos \sqrt{x} & \text{pour } x \geq 0 \\ \cosh(-\sqrt{x}) & \text{pour } x \leq 0 \end{cases}$$

[4].

Chapitre 3

Introduction à l'équation de Schrödinger

3.1 Equation 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,

$$\Psi(\vec{r}, t). \quad (3.1)$$

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

$$P(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2; \quad (3.2)$$

lorsque cette densité de probabilité ne dépend pas du temps, on dit que le système est dans un état "stationnaire" [6].

3.1.1 Equation de Schrödinger stationnaire

L'équation de Schrödinger d'un système quantique s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi \quad (3.3)$$

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 .

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

Où Ψ_0 est l'amplitude. Ψ dépend des coordonnées de l'espace de configuration mais ne dépend pas du temps. Substituant l'équation (3.4) dans (3.3) nous obtenons :

$$H\Psi = E\Psi \quad (3.5)$$

H étant l'opérateur différentiel :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \quad (3.6)$$

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

3.1.2 Equation de Schrödinger dans un système polaire

Comme le potentiel V ne dépend que de la distance r de la particule à l'origine, ce sont les coordonnées sphériques qui sont les mieux adaptées pour résoudre l'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien H , observable associée à l'énergie totale. Si P est l'impulsion de la particule, r son vecteur position, l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r) \quad (3.7)$$

Exprimons l'énergie cinétique $\frac{P^2}{2m}$ en fonction d'opérateurs hermétiques construits avec les opérateurs différentiels $\frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \theta}$ et $\frac{\partial}{\partial \varphi}$ afin de mieux saisir la signification physique du résultat.

On écrit :

$$L \equiv r \wedge P = \frac{\hbar}{i} (r \wedge \nabla) \quad (3.8)$$

ceci en se référant à la définition des opérateurs $P : p_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i}$ où q_i sont des observables de position. L'impulsion radiale se met :

$$p_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad (3.9)$$

par définition p_r commute avec n'importe quelle fonction de θ et φ ainsi qu'avec les trois composantes de L . On a aussi :

$$[r, p_r] = i\hbar \quad (3.10)$$

en conservant l'ordre des opérateurs on obtient :

$$L^2 \equiv (r \wedge p) \cdot (r \wedge p) = r^2 p^2 - (r \cdot p)^2 + i\hbar (r \cdot p) \quad (3.11)$$

selon l'application répétée des relations de commutation $[r_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$, on a aussi :

$$r \cdot p = r \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} = r p_r + i\hbar \quad (3.12)$$

comme tenu de la relation ci-dessus, et avec quelques manipulations de la première partie de la relation (3.11) nous obtenons : $(r \cdot p)^2 - i\hbar (r \cdot p) \equiv ((r \cdot p) - i\hbar) (r \cdot p) = r \cdot p_r (r \cdot p_r + i\hbar) = r^2 p_r^2$.

La relation (3.11) devient alors : $L^2 = r^2 p^2 - r^2 p_r^2 = r^2 (p^2 - p_r^2)$. En divisant membre à membre par r^2 , on obtient une identité entre opérateurs valable partout sauf pour $r = 0$.

$$P^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \quad (r \neq 0) \quad (3.13)$$

En divisant membre à membre par $2m$ pour obtenir la relation de l'énergie cinétique, on obtient l'expression de l'Hamiltonien en coordonnées polaires.

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad (3.14)$$

En utilisant les expressions des trois composantes du moment cinétique L en coordonnées polaires :

$$\begin{aligned} L_x &= i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ L_y &= i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ L_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned} \quad (3.15)$$

on arrive à

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) \quad (3.16)$$

En conclusion, l'équation de Schrödinger en coordonnées polaires se présente comme :

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.17)$$

3.1.3 Séparation des variables

Nous aurons à franchir deux étapes :

- Résolutions du problème des valeurs propres de L^2
- Former les fonctions propres communes aux opérateurs qui commutent H , L^2 , et L_z

Dépendances angulaires des fonctions propres :

Puisque L^2 agit exclusivement sur les variables angulaires θ et φ , la variable r joue le rôle d'un simple paramètre. Les fonctions propres des opérateurs différentiels L^2 et L_z sont des fonctions appelées, harmoniques sphériques c , elles sont repérées par les indices l et m , on a :

$$\begin{aligned} L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) &= l(l+1) \hbar^2 Y_l^m(\theta, \varphi) \\ L_z Y_l^m(\theta, \varphi) &= m \hbar Y_l^m(\theta, \varphi) \\ (l &= 0, 1, 2, \dots, \infty; m = -l, -l+1, \dots, +l) \end{aligned} \quad (3.18)$$

A chaque couple de nombre quantique (l, m) correspond une seule harmonique sphérique. Les solutions $\Psi(r, \theta, \varphi)$ correspondent à des valeurs de l et m fixées, sont forcément des produits d'une fonction de r seul par l'harmonique sphérique $Y_l^m(\theta, \varphi)$:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R_l(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (3.19)$$

L'équation radiale :

Du fait que $\Psi(r, \theta, \varphi)$ est solution de l'équation (3.17) et que $Y_l^m(\theta, \varphi)$ est fonction propre de L^2 , on voit que $Y_l^m(\theta, \varphi)$ se sépare, ainsi après simplification, on obtient l'équation radiale :

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] R_l(r) = ER_l(r) \quad (3.20)$$

Où $p_r^2 \equiv -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r$. Comme nous l'avons déjà signalé dans l'expression de l'Hamiltonien que la valeur $r = 0$ n'est pas forcément valable. Il faudra donc s'assurer que le comportement à l'origine des solutions $R_l(r)$ est suffisamment régulier pour que (3.19) soit effectivement une solution de (3.17). Posons en effet :

$$R_{k,l}(r) = \frac{1}{r} U_{k,l}(r) \quad (3.21)$$

L'indice k , qui peut être discret ou continu, permet de repérer les différentes valeurs propres associées à la même valeur de l . En multipliant les deux membres de (3.20) par r , on obtient pour $U_{k,l}(r)$ l'équation différentielle suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] U_{k,l}(r) = EU_{k,l}(r) \quad (3.22)$$

Dont on notera la ressemblance avec l'équation de Schrödinger à une dimension

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(r) \right) \Psi = E\Psi$$

sauf qu'à l'énergie potentielle $V(r)$ s'ajoute un terme

$\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ que l'on peut appeler terme de force centrifuge et qui disparaît pour $l = 0$.

Comportement à l'origine des solutions ($r \rightarrow 0$) :

Nous allons faire l'hypothèse que, pour r tendant vers zéro, le potentiel $V(r)$ reste fini, ou au moins ne tend pas vers l'infini plus rapidement que $\frac{1}{r}$, où $V(r)$ vérifie la condition suivante : $\lim_{r \rightarrow 0} V(r) r^2 = 0 \Rightarrow V(r \rightarrow 0) = \frac{1}{r^\alpha}$, $\alpha < 2$. Cette hypothèse est vérifiée dans la plupart des cas.

Considérons une solution de (3.20) et supposons qu'elle se comporte à l'origine comme r^s :

$$R_{k,l}(r)_{r \rightarrow 0} = Cr^s \quad (3.23)$$

En reportant (3.23) dans (3.20) et en égalant à zéro le coefficient du terme dominant, on obtient l'équation : $-s(s+1) + l(l+1) = 0$ et par suite : $s = +l$, $s = -(l+1)$.

Pour une valeur donnée de $E_{k,l}$, on peut donc trouver deux solutions linéairement indépendantes de l'équation (3.20). Les solutions acceptables de l'équation (3.20) s'annulent à l'origine quelque soit l , puisque :

$$U_{k,l}(r)_{r \rightarrow 0} \sim Cr^{l+1} \quad (3.24)$$

Par conséquent, il faut adjoindre à l'équation (3.22) la condition :

$$U_{k,l}(0) = 0 \quad (3.25)$$

Donc il faut retenir les solutions régulières qui assurent la fonction $\Psi_{k,l,m}(r, \theta, \varphi)$ soit solution de l'équation de Schrödinger partout, origine comprise. Sans oublier que les fonctions $\Psi_{k,l,m}(r, \theta, \varphi)$ doivent être de carré sommable.

Comportement asymptotique ($r \rightarrow \infty$) :

Supposons le potentiel $V(r)$ tend asymptotiquement vers zéro plus vite que $\frac{1}{r}$:

$\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) = 0$, l'équation (3.22) se réduit à :

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{k,l}(r) + K^2 U_{k,l}(r)_{r \rightarrow \infty} \simeq 0 \quad (3.26)$$

où $K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et parce que $V(r)$ s'annule à l'infini et que $\frac{l(l+1)}{r^2}$ tend vers 0. Le spectre d'énergie comporte deux parties :

$$\begin{aligned} \text{si } E_{k,l} < 0 : U_{k,l}(r)_{r \rightarrow \infty} &\sim \exp(-xr) \text{ où } x = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \\ \text{si } E_{k,l} > 0 : U_{k,l}(r)_{r \rightarrow \infty} &\sim A \exp(ikr) + B \exp(-ikr) \end{aligned} \quad (3.27)$$

La dernière expression représente la superposition d'une onde plane « incidente » $\exp(-ikr)$ et une onde plane « réfléchie » $\exp(ikr)$ [7,8].

Chapitre 4

détermination des états liés dans le cas d'un potentiel harmonique

4.1 Le potentiel harmonique

Rappelons que le potentiel pour un ressort de constante de raideur K est

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2. \quad (4.1)$$

On obtient la force par dérivation (dans le cas unidimensionnel) : $F = -\frac{\partial V}{\partial x} = -Kx$.

Notre intérêt pour le système masse-ressort vient du fait qu'il constitue un modèle simplifié de ce qu'il se passe pour un grand nombre d'autres situations. Prenons pour commencer un exemple concret : le modèle classique d'un cristal.

Modèle classique d'un cristal :

Dans un cristal, les atomes sont liés les uns aux autres par des forces (électrostatiques) qui les piègent dans des positions précises, organisés dans le réseau cristallin. Chaque atome est donc contraint d'occuper une position donnée, correspondante au minimum du potentiel électrostatique produit par tous les autres atomes. A température donnée l'atome possède cependant une certaine énergie et peut donc se déplacer autour de sa position d'équilibre.

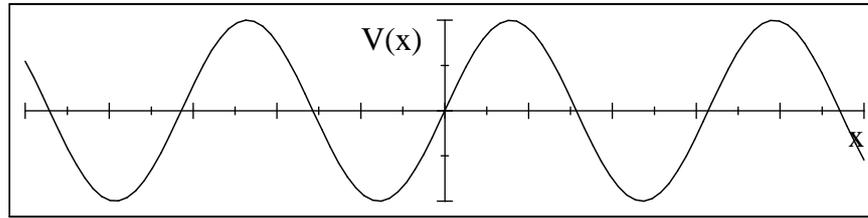


FIG. 4-1 – Projection le long d'un axe x du potentiel périodique qui piège les atomes dans un cristal. Chaque minimum correspond à une position d'équilibre. Pour x petit, le potentiel peut être approché par une fonction quadratique.

Nous ne connaissons pas la forme exacte de ce potentiel, dont la composante le long d'un axe x est schématisée sur la figure (4.1). Cependant, si l'atome n'effectue que des petits déplacements autour de sa position d'équilibre (température faible), alors on peut approcher le potentiel autour de son minimum par un développement de Taylor. Prenons par exemple la position d'équilibre $x = 0$: pour x petit, on a

$$V(x) = V(0) + \frac{\partial V}{\partial x}(0)x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}(0)x^2 + O(x^3). \quad (4.2)$$

Dans cette expression, $V(0)$ est une constante qu'on peut mettre à zéro sans perte de généralité (il suffit de redéfinir le zéro du potentiel), $\frac{\partial V}{\partial x}(0)$ est nulle car $x = 0$ est un minimum de $V(x)$, et $\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}(0)$ est une autre constante que l'on va appeler K : on obtient donc au second ordre en x

$$V(x) \simeq \frac{1}{2}Kx^2, \quad (4.3)$$

un potentiel quadratique en x (dit aussi harmonique) en x , c'est à dire exactement le même que pour un ressort ! L'atome se déplace donc autour de sa position d'équilibre comme une masse accrochée à un ressort, dont la raideur K dépend de la forme explicite de son potentiel d'interaction avec les autres atomes du réseau.

Peut-on généraliser ce même raisonnement pour d'autres problèmes ? La réponse est oui, et, de plus, c'est très général : pour chaque système lié par un potentiel autour d'une position d'équilibre, le potentiel est à son minimum peut être approché par un potentiel harmonique [9].

4.2 Etude analytique

Nous allons maintenant introduire dans la fonction d'onde une fonction sous forme de série entière, dont les coefficients doivent être déterminés à partir d'une suite d'équations obtenues après introduction de la fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger (3.22). En travaillant avec le potentiel du type $V(r) = ar^2$, nous aurons aussi des contraintes entre les paramètres du potentiel, dont les énergies et les états propres du système correspondront à ces contraintes.

La solution de l'équation de Schrödinger avec le potentiel $V(r)$ s'écrit comme suit :

$$U(r) = U_0(r)U_\infty(r)U_s(r)$$

où $U_0(r)$ est la solution au comportement à l'origine ($r \rightarrow 0$), $U_\infty(r)$ est la solution au comportement asymptotique ($r \rightarrow \infty$) et $U_s(r)$ la fonction inconnue que nous allons proposer en forme de série entière. Cette solution est lié au paramètre a du potentiel.

La fonction $U_s(r)$ que nous proposons s'écrit comme :

$$U_s(r) = \sum_{n=0}^q a_n r^{n+t}$$

$\{a_n\}$ représentent les coefficients inconnus de l'expansion.

t paramètre lié à a .

On injecte l'expression du potentiel $V(r)$ dans l'équation (3.22), il vient :

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (ar^2 - E) \right) U(r) = 0 \quad (4.4)$$

La nécessité de prendre les unités : $2m = \hbar = 1$ n'est qu'un choix de convenance [8].

On pose : $\alpha^2 = a$.

L'équation différentielle devient :

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \alpha^2 r^2 - E \right) U(r) = 0$$

En introduisant une nouvelle variable x telle que, $x = \sqrt{\alpha} r$, on obtient,

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} + x^2 - \frac{E}{\alpha} \right) U(x) = 0$$

- *Etude du comportement asymptotique* ($x \rightarrow \infty$)

L'équation se réduit, et on a :

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2\right) U_\infty(x) = 0$$

La solution de cette équation :

$$U_\infty(x) \propto \exp - \left(\frac{x^2}{2}\right)$$

- *Etude du comportement à l'origine* ($x \rightarrow 0$)

$$U_0(x) \propto \exp - (\beta x)$$

La solution générale se met sous la forme

$$U(x) = \left[\exp - \left(\frac{x^2}{2}\right)\right] [\exp - (\beta x)] \left[\sum_{n=0}^q a_n r^{n+t}\right]$$

où t et β , sont des paramètres .

On pose : $l = 0$ et $\alpha = \sqrt{a} = 1 \rightarrow x = r$, (voir [7, 8]), on aura alors :

$$U(r) = \left(\exp - \left(\frac{2\beta r + r^2}{2}\right)\right) \sum_{n=0}^q a_n r^{n+t} \quad (4.5)$$

L'expression (4.4), sera :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + (E - r^2)\right) U(r) = 0 \quad (4.6)$$

En remplaçant l'expression de $U(r)$ dans (4.6), on obtient l'expression suivante :

$$U_s''(r) + 2(-\beta - r) U_s'(r) + (E + \beta^2 + 2\beta r - 1) U_s(r) = 0 \quad (4.7)$$

En introduisant les expressions de $U_s(r)$, $U_s'(r)$ et $U_s''(r)$ dans l'équation précédente on aura :

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^q (n+t)(n+t-1) a_n r^{n+t-2} + (-2\beta - 2r) \left(\sum_{n=0}^q (n+t) a_n r^{n+t-1}\right) \\ & + (E + \beta^2 + 2\beta r - 1) \left(\sum_{n=0}^q a_n r^{n+t}\right) = 0 \end{aligned}$$

Après quelques manipulations mathématiques il vient :

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^q \left[\frac{2\beta a_{n-1} + (-2(n+t) + E + \beta^2 - 1) a_n}{+(-2\beta(n+t+1)) a_{n+1} + (n+t+2)(n+t+1) a_{n+2}} \right] r^{n+t} \\ & + [t(t-1) a_0 r^{t-2} + ((-2\beta t) a_0 + t(t+1) a_1) r^{t-1}] \\ & + [(-2t + E + \beta^2 - 1) a_0 + (-2\beta(t+1)) a_1 + (t+2)(t+1) a_2] r^t = 0 \end{aligned}$$

En réunissant les termes semblables et annulant les coefficients des différentes puissances de r , on obtient une suite d'équations :

$$r^{t-2} : t(t-1) a_0 = 0 \quad (4.8)$$

$$r^{t-1} : (-2\beta t) a_0 + t(t+1) a_1 = 0 \quad (4.9)$$

$$r^t : (-2t + E + \beta^2 - 1) a_0 + (-2\beta(t+1)) a_1 + (t+2)(t+1) a_2 = 0 \quad (4.10)$$

⋮

$$r^{n+t} : \sum_{n=1}^q \left[\frac{2\beta a_{n-1} + (-2(n+t) + E + \beta^2 - 1) a_n}{+(-2\beta(n+t+1)) a_{n+1} + (n+t+2)(n+t+1) a_{n+2}} \right] = 0 \quad (4.11)$$

Étudions tout d'abord la première éq (4.8) :

$$\begin{aligned} & a_0 = 0 \\ \text{et} & t(t-1) \neq 0 \end{aligned} \quad (4.12)$$

ou

$$\begin{aligned} & a_0 \neq 0 \\ \text{et} & t(t-1) = 0 \Rightarrow \begin{cases} t = 0 \\ \text{ou} \\ t = 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.13)$$

On prend le cas $a_0 \neq 0$ pour déterminer les valeurs de t :

pour facilité le calcul on pose :

$$a_0 = 1 \tag{4.14}$$

► Dans le cas où $t = 0$:

• l'éq (4.9) \longrightarrow

$$a_1 = \frac{2\beta}{t+1}a_0 = 2\beta \tag{4.15}$$

• l'éq (4.10) \longrightarrow

$$(E + \beta^2 - 1) a_0 + (-2\beta) a_1 + 2a_2 = 0 \tag{4.16}$$

remplaçant (4.14) et (4.15) dans l'éq (4.16) on aura :

$$a_2 = -\frac{(E + \beta^2 - 1) - 2\beta}{2} \tag{4.17}$$

► Dans le cas où $t = 1$:

• l'éq (4.9) \longrightarrow

$$a_1 = \beta \tag{4.18}$$

• l'éq (4.10) \longrightarrow

$$(E + \beta^2 - 3) a_0 + (-4\beta) a_1 + 6a_2 = 0 \tag{4.19}$$

remplaçant (4.14) et (4.18) dans l'éq (4.19) on aura :

$$a_2 = -\frac{(E + \beta^2 - 3) - 2\beta}{6} \tag{4.20}$$

On pose l'éq (4.11) comme :

$$P_n a_n + Q_{n+1} a_{n+1} + R_{n+2} a_{n+2} + S_{n-1} a_{n-1} = 0 \tag{4.21}$$

en sachant que :

$$\begin{pmatrix} P_n = -2(n+t) + (E + \beta^2 - 1) \\ Q_n = -2\beta(n+t) \\ R_n = (n+t)(n+t-1) \\ S_n = 2\beta \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

4.2.1 Détermination des énergies et des fonctions propres

► **Dans le cas où $t = 0$:**

alors : $a_0 = 1$, $a_1 = 2\beta = 1$, $a_2 = -\frac{(E+\beta^2-1)-2\beta}{2}$, $\beta = \frac{1}{2}$.

$$\begin{aligned} \bullet n = 0 : & \begin{cases} U_0(x) = \exp\left(-\left(\frac{2\beta x + x^2}{2}\right)\right) \\ P_0 = 0 \rightarrow P_0 = -2t + (E + \beta^2 - 1) = 0 \Rightarrow E = \frac{3}{4} \\ a_2 = \frac{1}{2} \end{cases} \\ \bullet n = 1 : & \begin{cases} U_1(x) = (x+1) \exp\left(-\left(\frac{2\beta x + x^2}{2}\right)\right) \\ P_1 = 0 \rightarrow P_1 = -2(t+1) + (E + \beta^2 - 1) = 0 \Rightarrow E = \frac{11}{4} \\ a_2 = -\frac{1}{2} \end{cases} \\ \bullet n = 2 : & \begin{cases} U_2(x) = (a_2 x^2 + x + 1) \exp\left(-\left(\frac{2\beta x + x^2}{2}\right)\right) \\ P_2 = 0 \rightarrow P_2 = -2(t+2) + (E + \beta^2 - 1) = 0 \Rightarrow E = \frac{19}{4} \\ a_2 = -\frac{3}{2} \end{cases} \end{aligned}$$

Tableau IV-1

n	a_n	P_n	E	$U_n(x)$
0	$a_0 = 1$	$-2t + (E + \beta^2 - 1)$	$\frac{3}{4}$	$\exp\left(-\left(\frac{2\beta x + x^2}{2}\right)\right)$
1	$a_0 = 1$ $a_1 = 1$	$-2(t + 1) + (E + \beta^2 - 1)$	$\frac{11}{4}$	$(x + 1) \exp\left(-\left(\frac{2\beta x + x^2}{2}\right)\right)$
2	$a_0 = 1$ $a_1 = 1$ $a_2 = -\frac{3}{2}$	$-2(t + 2) + (E + \beta^2 - 1)$	$\frac{19}{4}$	$\left(-\frac{3}{2}x^2 + x + 1\right) \exp\left(-\left(\frac{2\beta x + x^2}{2}\right)\right)$

* **Détermination des fonctions propres :**

- Pour le cas : $U_0(x) = \exp\left(-\frac{x+x^2}{2}\right)$

La fonction d'onde relative au cas $n = 0$

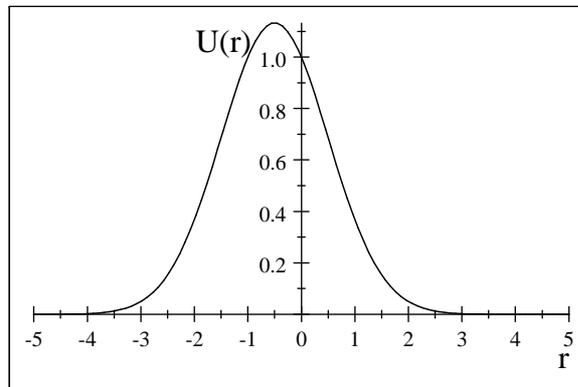


FIG. 4-2 - La fonction $U_0(r)$ non normalisée correspondante à l'état fondamental.

- Pour le cas : $U_1(x) = (x + 1) \exp\left(-\frac{x+x^2}{2}\right)$

La fonction d'onde relative au cas $n = 1$

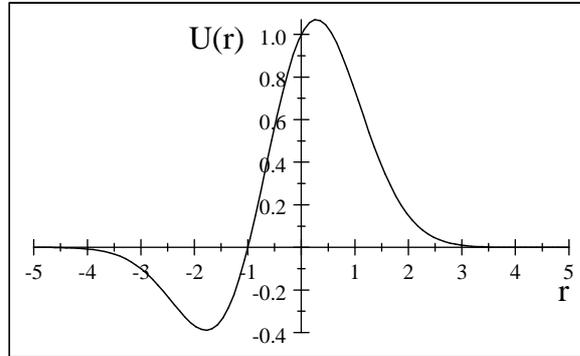


FIG. 4-3 - La fonction $U_1(r)$ non normalisée correspondante au premier état excité.

- Pour le cas : $U_2(x) = \left(-\frac{3}{2}x^2 + x + 1\right) \exp\left(-\frac{x+x^2}{2}\right)$

La fonction d'onde relative au cas $n = 2$

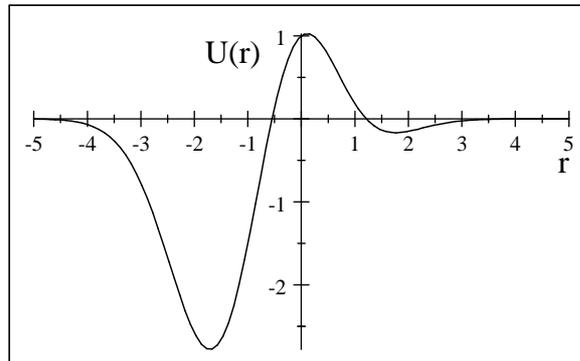


FIG. 4-4 -La fonction $U_2(r)$ non normalisée correspondante au deuxième état excité .

Discussion : On remarque que le cas $t = 0$ montre que :

pour $n = 0$ le graphe ne présente aucun noeud donc l'état illustré est l'état fondamental,

pour $n = 1$ le graphe présente un noeud donc c'est le premier état excité,

et le deuxième état excité sera présenter en $n = 2$.

► **Dans le cas où $t = 1$:**

alors : $a_0 = 1$, $a_1 = \beta = \frac{1}{2}$, $a_2 = -\frac{(E+\beta^2-3)-2\beta}{6}$, $\beta = \frac{1}{2}$.

$$\bullet n = 0 : \begin{cases} U_0(x) = x \exp\left(-\left(\frac{2\beta x+x^2}{2}\right)\right) \\ P_0 = 0 \rightarrow P_0 = -2t + (E + \beta^2 - 1) = 0 \Rightarrow E = \frac{11}{4} \\ a_2 = \frac{1}{6} \end{cases}$$

$$\bullet n = 1 : \begin{cases} U_1(x) = \left(\frac{1}{2}x^2 + x\right) \exp\left(-\left(\frac{2\beta x+x^2}{2}\right)\right) \\ P_1 = 0 \rightarrow P_1 = -2(t+1) + (E + \beta^2 - 1) = 0 \Rightarrow E = \frac{19}{4} \\ a_2 = -\frac{1}{6} \end{cases}$$

$$\bullet n = 2 : \begin{cases} U_2(x) = \left(a_2x^3 + \frac{1}{2}x^2 + x\right) \exp\left(-\left(\frac{2\beta x+x^2}{2}\right)\right) \\ P_2 = 0 \rightarrow P_2 = -2(t+2) + (E + \beta^2 - 1) = 0 \Rightarrow E = \frac{27}{4} \\ a_2 = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

Tableau IV-2

n	a_n	P_n	E	$U_n(x)$
0	$a_0 = 1$	$-2t + (E + \beta^2 - 1)$	$\frac{11}{4}$	$x \exp\left(-\left(\frac{2\beta x+x^2}{2}\right)\right)$
1	$a_0 = 1$ $a_1 = \frac{1}{2}$	$-2(t+1) + (E + \beta^2 - 1)$	$\frac{19}{4}$	$\left(\frac{1}{2}x^2 + x\right) \exp\left(-\left(\frac{2\beta x+x^2}{2}\right)\right)$
2	$a_0 = 1$ $a_1 = \frac{1}{2}$ $a_2 = -\frac{1}{2}$	$-2(t+2) + (E + \beta^2 - 1)$	$\frac{27}{4}$	$\left(-\frac{1}{2}x^3 + \frac{1}{2}x^2 + x\right) \exp\left(-\left(\frac{2\beta x+x^2}{2}\right)\right)$

* **Détermination des fonctions propres :**

- Pour le cas : $U_0(x) = x \exp\left(-\frac{x+x^2}{2}\right)$

La fonction d'onde relative au cas $n = 0$

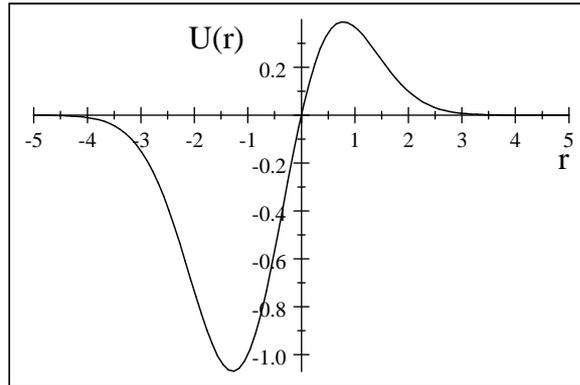


FIG. 4-5 -La fonction $U_0(r)$ non normalisée correspondante au premier état excité.

- Pour le cas : $U_1(x) = \left(\frac{1}{2}x^2 + x\right) \exp\left(-\frac{x+x^2}{2}\right)$

La fonction d'onde relative au cas $n = 1$

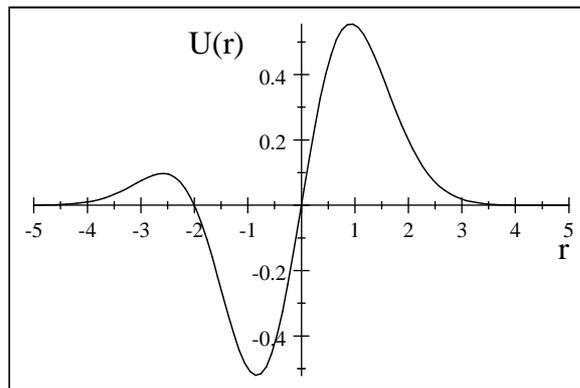


FIG. 4-6 -La fonction $U_1(r)$ non normalisée correspondante au deuxième état excité.

- Pour le cas : $U_2(x) = \left(-\frac{1}{2}x^3 + \frac{1}{2}x^2 + x\right) \exp\left(-\frac{x+x^2}{2}\right)$

La fonction d'onde relative au cas $n = 2$

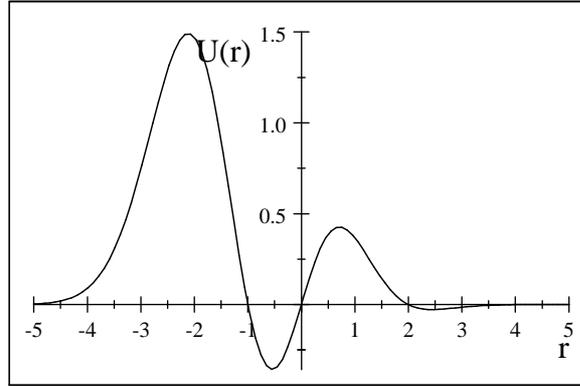


FIG. 4-7 -La fonction $U_2(r)$ non normalisée correspondante au deuxième état excité.

Discussion : *D'après ces exemples on remarque que le cas $t = 1$ présente le premier état excité, le deuxième état excité et le troisième état excité pour $n = 0$, $n = 1$ et $n = 2$ successivement.*

4.2.2 Conclusion :

D'après ce qui a précédé on peut conclure que selon les états propres correspondants aux valeurs des énergies calculées selon les deux cas pour $t = 0$ et $t = 1$; on peut facilement arriver à n états, mais la différence sera de un état fondamental manquant pour le cas $t = 1$.

Donc on préfère prendre en considération que le cas $t = 0$ pour avoir tout les états correspondants.

Selon les résultats correspondants au tableau IV-1, on peut vérifier les résultats suivants :

$$E_n = \frac{1}{2} \left(n + (2n + 1) \frac{3}{2} \right) = 2n + \frac{3}{4} \quad (4.23)$$

$$U(r) = \left(\exp - \left(\frac{r + r^2}{2} \right) \right) \sum_{n=0}^q a_n r^n \quad (4.24)$$

$$a_0 = 1, a_1 = 1, a_2 = \frac{1}{2} - n \quad (4.25)$$

$$a_{n+2} = - \frac{a_{n-1} - (n + 1) a_{n+1}}{(n + 2)(n + 1)}, n \geq 1 \quad (4.26)$$

Alors on peut arriver à n états.

Conclusion Générale

Comme nous l'avons vu au début de ce travail, les états stationnaires correspondent aux solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger, où la densité de probabilité est indépendante du temps. Nous avons voulu chercher les états stationnaires et les niveaux d'énergie correspondants, sans oublier de mentionner la nécessité de préciser le système physique étudié et le potentiel utilisé.

Dans une tentative pour avoir des résultats exacts, nous avons abordé les points suivants :

- une introduction aux séries entières pour mieux comprendre la méthode utilisée dans notre travail.

- l'utilisation des séries entières dans les équations différentielles pour résoudre les équations différentielles linéaires, en s'appuyant sur quelques outils mathématiques, et pour mieux comprendre son usage, nous avons cité quelques exemples déjà traités auparavant.

- Ensuite, une introduction à l'équation de Schrödinger stationnaire qui pourrait apporter une vue sur l'ensemble des équations nécessaires pour le reste du travail, et qui nous donne un premier résultat fondamental : la quantification de l'énergie des états liés.

- Enfin nous avons pu introduire le potentiel et la méthode sur l'équation de Schrödinger pour un cas central, qui est le potentiel harmonique et obtenir à la suite de nombreuses manipulations et calculs des résultats exacts pour des valeurs de $n = 0, 1, 2$. A la suite de ces résultats nous avons pu généralisé ces valeurs jusqu'à n états. sans oublier de pouvoir représenter graphiquement les fonctions d'ondes dans chaque situation envisagée.

A la suite de cette étude nous pouvons conclure que les résultats obtenus à partir de cette méthode qui paraît très prometteuse pour cette application, et a permis la résolution exacte de l'équation de Schrödinger (peut être convenablement généralisée pour s'appliquer aux systèmes doués de potentiels encore plus complexes). Pour tous les cas d'intérêt physique nous pourrions nous attendre à ce que les résultats soient d'une bonne approximation.

Il est inutile de dire que ce programme grandiose est encore très loin d'avoir été complètement réalisé, nos connaissances mathématiques sont tout à fait inadéquates pour résoudre exactement l'équation de Schrödinger pour un système compliqué, bien que nous puissions parfaitement bien manipuler les systèmes simples.

Bibliographie

- [1] F. Géandier, "cours des mathématique", UNV Nancy, 2010 - 2011.
- [2] L. Rozoy, B. Ycart, "cours les séries entières", UNV Joseph Fourier, Grenoble, 2012.
- [3] S. Balac, "cours des mathématique", INSA de Lyon.
- [4] C. Boulonne, cours, " Suites et séries de fonctions", UNV de Lille, 2007-2008.
- [5] V. Smirnou, Cours de mathématiques supérieures, Tome 2, OPU.
- [6] A. Sinatra, Cours , " introduction à la mécanique quantique", 2008.
- [7] Y. Boumedjane, Thèse de Magister, Université de Biskra, (2000).
- [8] N. Bensalah, Thèse de Magister, Université de Biskra, (2003).
- [9] M. Barbi, Cours "introduction a l'analyse spectrale", Unv Pierre et Marie Curie, Parie, 2005.

الملخص:

استعملنا في هذا العمل السلاسل التامة لحل معادلة شرودنجر من اجل حالة كمون اهتزازي من الشكل

$$V(r) = ar^2$$
 لإيجاد الحالات المرتبطة.

Résumé :

Nous avons utilisé dans ce travail les séries entières pour résoudre l'équation de Schrödinger dans le cas d'un potentiel harmonique de la forme $V(r) = ar^2$, pour trouver les états liés.

Abstract:

We used in this work the whole series to solve the equation of Schrödinger in the case of a harmonic potential of the form $V(r) = ar^2$, to find the states dependant.