



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

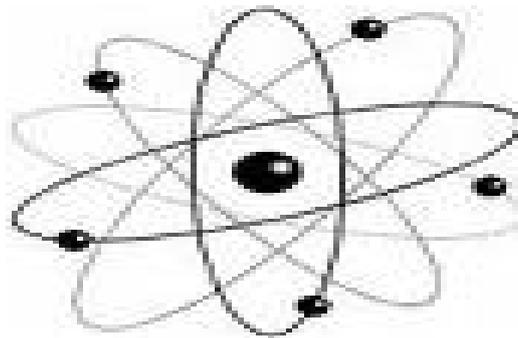


Département des Sciences de la Matière

Domaine des Sciences de la Matière

Filière de Physique

Spécialité Physique des Matériaux



Mémoire de fin d'étude en Master

Intitulé :

**Introduction de quelques approches
variationnelles récentes**

Presenté par: Benaissa Mofida

Devant le Jury Composé par :

M. Moumni

A. Zerarka

N. Bensalah

M.C. « A »

Professeur

M.C. « B »

Université Med Khider- Biskra

Université Med Khider- Biskra

Université Med Khider - Biskra

Président

Rapporteur

Examineur

Année Universitaire

2013-2014

Tables des Matières

Introduction	01
Chapitre I: Introduction aux calculs variationnelles	
I.1 Introduction.....	02
I.2 Le calcul variations.....	02
I.2.1 L'équation d'Euler-Lagrange.....	02
I.2.2 Premières intégrales.....	04
I.2.3 Quelques exemples.....	04
I.2.3.1 La brachistochrone.....	04
I.2.3.2 Le principe de Fermat de moins de temps.....	05
I.2.3.3 Géodésiques.....	06
I.2.4 Cas plus généraux.....	07
I.2.5 Variables dépendante, une variable indépendante.....	07
I.2.5.1 Plusieurs variables indépendantes, une variable dépendante.....	07
I.3 Méthode de Ritz.....	08
I.3.1 Energie cinétique.....	08
I.3.2 Energie potentielle.....	09
I.3.3 Minimisation de la fonctionnelle énergie.....	09
Chapitre II: L'approche variationnelle	
II.1 Description.....	10
II.2 Equation d'Euler-Lagrange.....	10
II.2.a Notion de fonctionnelle.....	10
II.2.b Démonstration de l'équation d'Euler-Lagrange.....	11
II.3 Application.....	12
-Exemple L'oscillateur harmonique.....	12
Chapitre III: Equation de Schrödinger radiale	
III.1 Equation de Schrödinger dans un potentiel central.....	14

III.1.1 Equation radiale.....	14
III.1.2 Les solutions au voisinage de l'origine.....	15
III.1.3 Comportement asymptotique.....	16
III.2 Méthode variationnelle semi-inverse.....	16
Chapitre IV: Applications	
IV.1 Introduction.....	19
IV.2 le cas classique.....	19
IV.3 le cas quantique.....	21
Conclusion	30

Introduction générale

Introduction

La plupart des problèmes de la physique ne peuvent être résolus exactement, et donc ont besoin d'être traités approximativement. Il existe des méthodes couramment utilisées dans la mécanique quantique: telle que la méthode variationnelle. La première introduction aux calculs variationnels est la méthode de Ritz. Supposons qu'on nous demande de calculer les niveaux énergétiques pour une particule dans un potentiel donné, et supposons également que nous ne sommes pas capables de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger aux états stationnaires par exemple, alors l'introduction de cette approche peut construire des solutions plus ou moins exactes. La 2^{ème} approche variationnelle étudie l'équation d'Euler-Lagrange. Nous avons utilisé une application classique de l'oscillateur harmonique pour accéder aux différentes solutions. Nous étudions ensuite l'équation de Schrödinger radiale pour un système de symétrie sphérique, c'est-à-dire, une particule se déplaçant sous l'influence d'un potentiel central, mais cet argument reste applicable aussi pour des interactions arbitraires. Enfin nous appliquons réellement la méthode semi-inverse variationnelle pour un type de potentiel et qui concerne le potentiel harmonique isotrope, pour trouver les énergies et les états correspondants E et $R(r)$ respectivement.

Chapitre I

Introduction aux calculs variationnels

I.1 Introduction

La technique que nous allons donner est d'une importance centrale dans la théorie de la dynamique, et plus généralement, pour trouver l'équation du mouvement pour plusieurs systèmes physiques, un exemple classique est donné par le problème de brachistochrone de Jean Bernoulli. Nous envisageons une particule, déplacée par une distance horizontale, et une distance verticale d'un point particulier A. Nous supposons la particule commence à l'origine O. Le problème qui se pose est alors: sur quel chemin de O à un point donné A sera une particule (au repos à l'O), sous la gravité, et sans friction, dans moins de temps.

Commençons l'écriture de l'énergie de la particule, à tout instant, comme suivant

$$\frac{1}{2} v^2 = gy, \quad (\text{I.1})$$

(Où nous avons mis la masse égale à l'unité). Nous pouvons alors écrire le temps pris pour un mouvement particulier comme

$$T = \int_0^T dt,$$

$$\begin{aligned}
&= \int \frac{ds}{v}, \\
&= \int_0^a \frac{(1+y'^2)^{1/2}}{(2gy)^{1/2}} dx.
\end{aligned} \tag{I.2}$$

T est une fonctionnelle de la trajectoire $y(x)$ en question. Nous écrivons $T[y(x)]$, et une fois $y(x)$ est donnée nous pouvons calculer $T[y]$. La question est quelle y minimisant T

I.2 Le calcul des variations

I.2.1 L'équation d'Euler-Lagrange :

Pour répondre à cela, nous considérons un problème plus général. Donnée une fonctionnelle $F(x, y, y')$, où $y = y(x)$, nous formons la fonctionnelle [1-6]

$$I[y] = \int_a^b dx F(x, y, y'). \tag{I.3}$$

On cherche à trouver des valeurs fixes de I entre les points d'extrémité fixes, telles que $y(a)$, et $y(b)$ sont données. Notre objectif est de choisir y de manière que $I[y]$ soit stationnaire, c'est-à-dire

$$\delta y = 0. \tag{I.4}$$

Plus explicitement, nous aurons besoin de $\delta y = \varepsilon \eta(x)$, pour les petites valeurs de ε et $\eta(x)$ est arbitraire sauf pour $\eta(a) = \eta(b) = 0$.

Nous étudions

$$\delta I = \varepsilon \left. \frac{\partial I}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon \rightarrow 0} = 0. \tag{I.5}$$

Nous procédons de la manière suivante et on écrit:

$$I(\varepsilon) = \int_a^b dx F(x, y + \varepsilon \eta, y' + \varepsilon \eta'). \tag{I.6}$$

Alors par intégration par parties, on a

$$\begin{aligned}\frac{\partial I}{\partial \varepsilon} &= \int_a^b dx \left(\frac{\partial F}{\partial y} \eta + \frac{\partial F}{\partial y'} \eta' \right) \\ &= \int_a^b dx \eta \left(\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial y'} \right) + \eta \frac{\partial F}{\partial y'} \Big|_a^b\end{aligned}\tag{I.7}$$

On voit, que le dernier terme est nul, puisque $\eta(a) = \eta(b) = 0$. Puisque, $\partial I / \partial \varepsilon = 0$ (évalué à $\varepsilon = 0$) et tient pour (sinon) $\eta(x)$ arbitraire si y obéit à

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial y'} = 0,\tag{I.8}$$

qui est l'équation d'Euler - Lagrange.

Noter que $\partial F / \partial x, \partial F / \partial y, \partial F / \partial y'$ ont des significations naturelles pour $F(x, y, y')$.

Cependant, dF/dx désigne la dérivée totale de F par rapport à x , avec F considérée comme une fonction de x par l'intermédiaire de $F(x, y(x), y'(x))$, c'est-à-dire

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} \frac{dy}{dx} + \frac{\partial F}{\partial y'} \frac{d^2 y}{dx^2}.\tag{I.9}$$

Comme notation, nous définissons

$$\frac{\delta F}{\delta y} = \frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial y'}.\tag{I.10}$$

Nous appelons $\delta F / \delta y$ le dérivée fonctionnelle de F par rapport à y . Alors, l'équation d'Euler - Lagrange est

$$\frac{\delta F}{\delta y} = 0\tag{I.11}$$

Une autre forme de l'équation d'Euler - Lagrange est

$$\frac{\delta F}{\delta x} = \frac{d}{dx} \left(F - y' \frac{\partial F}{\partial y'} \right).\tag{I.12}$$

Pour le prouver, regardons le membre droit de l'expression (12), (Right Hand Side).

$$\begin{aligned}
 \text{RHS} &= \frac{\partial F}{\partial x} + y' \frac{\partial F}{\partial y} + y'' \frac{\partial F}{\partial y'} - \left(y'' \frac{\partial F}{\partial y'} + y' \frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial y'} \right), \\
 &= \frac{\partial F}{\partial x} + y' \left(\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial y'} \right), \\
 &= \frac{\partial F}{\partial x}.
 \end{aligned} \tag{I.13}$$

En général, les équations d'Euler-Lagrange conduisent à une équation différentielle ordinaire non linéaire du second ordre. Ceci est généralement très difficile à résoudre directement. Cependant, nous savons qu'il peut y avoir un certain nombre de simplifications possibles.

I.2.2 Intégrale première

Il existe deux simplifications particulières des équations d'Euler-Lagrange qui sont très faciles à prouver. On va essayer de les exposer.

1. Supposons que $F = F(x, y')$ c'est-à-dire F ne dépend pas de y . Dans ce cas, les équations d'Euler-Lagrange impliquent

$$\frac{\partial F}{\partial y'} = \text{const.} \tag{I.14}$$

Il s'agit d'une équation différentielle ordinaire du premier ordre, et par conséquent beaucoup plus facile à traiter.

2. Supposons que $F = F(y, y')$ c'est-à-dire F ne dépend pas de x . Dans ce cas, la deuxième forme de l'équation d'Euler-Lagrange implique

$$F - y' \frac{\partial F}{\partial y'} = \text{const.} \tag{I.15}$$

I.2.3 Quelques exemples

Voyons comment tout cela fonctionne avec certains exemples physiques concrets.

I.2.3.1 La brachistochrone

La fonctionnelle en question est

$$\sqrt{2g}T = \int_0^a dx F(y, y'), \quad (\text{I.16})$$

avec

$$F(y, y') = \sqrt{\frac{1+y'^2}{y}}. \quad (\text{I.17})$$

Par le deuxième cas de l'intégrale première, l'équation d'Euler - Lagrange implique

$$\sqrt{\frac{1+y'^2}{y}} - y' \frac{1}{\sqrt{y}} \frac{y'}{\sqrt{1+y'^2}} = K, \quad (\text{I.18})$$

où K est une constante. Ceci implique que

$$y' = \sqrt{\frac{2c}{y} - 1}, \quad (\text{I.19})$$

avec $2c = 1/K^2$. Nous résolvons ceci de manière paramétrique, en posant

$$\begin{aligned} y &= 2c \sin^2 \theta \\ &= c(1 - \cos 2\theta), \end{aligned} \quad (\text{I.20})$$

tel que $\theta = 0$ à l'origine. Alors,

$$\begin{aligned} x &= \int \frac{\sqrt{2c} \sin \theta}{\sqrt{2c} \cos \theta} 2c \sin \left(\frac{\theta}{2}\right) \cos \left(\frac{\theta}{2}\right) d\theta, \\ &= c \int d\theta (1 - \cos \theta), \\ &= c \left(\theta - \frac{1}{2} \sin 2\theta \right), \end{aligned} \quad (\text{I.21})$$

Il s'agit de l'équation paramétrique d'une cycloïde.

I.2.3.2 Le principe de Fermat de moindre instant

Cet état montre qu'un rayon de lumière entre deux points fixes dans un milieu se déplaçant le long d'un chemin, il peut traverser dans un minimum de temps. L'indice de réfraction, n , dans le milieu est relié à la vitesse de la lumière par

$$n = \frac{c}{v}. \quad (\text{I.22})$$

Pour trouver le chemin, nous minimisons

$$T = \int dt = \int \frac{ds}{v} = \int n ds. \quad (\text{I.23})$$

Donnons $n(x, y)$ en deux dimensions, nous cherchons y pour $\delta T = 0$, où

$$T = \int dx \sqrt{1 + y'^2} n(x, y). \quad (\text{I.24})$$

Pour x indépendante de y , l'intégrale première donne

$$\frac{ny'}{\sqrt{1+y'^2}} = K, \quad (\text{I.25})$$

avec K une constante. Si est également indépendant de x , puis

$$y' = \text{constant}. \quad (\text{I.26})$$

Nous pouvons écrire $y' = \tan \theta$. Donc,

$$y' = \frac{y'}{\sqrt{1+y'^2}} = \text{constant} \quad (\text{I.27})$$

aussi. En regardant à l'interface, nous obtenons alors

$$K = n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2, \quad (\text{I.28})$$

qui est la loi de Snell.

I.2.3.3 Géodésiques

Un géodésique est le chemin de longueur minimale entre deux points fixes sur une surface donnée. A titre d'exemple, on considère la sphère unité.

$$S = \int ds, \quad (\text{I.29})$$

où

$$ds^2 = d\theta^2 + \sin^2(\theta)d\phi^2. \quad (\text{I.30})$$

Choisissons θ comme variable indépendante, et on cherche donc une solution de la forme $\phi(\theta)$:

$$S = \int d\theta F(\theta, \phi, \phi'), \quad (\text{I.31})$$

avec

$$F = \sqrt{1 + \sin^2(\theta)\phi'^2}, \quad (\text{I.32})$$

et le prime désigne la différenciation par rapport à θ . Maintenant, F est indépendante de ϕ , et ainsi, implique que $\partial F / \partial \phi'$ est une constante :

$$\frac{\sin^2(\theta)\phi'}{\sqrt{1 + \sin^2(\theta)\phi'^2}} = K, \quad (\text{I.33})$$

est une constante. Cette équation donne le chemin du grand cercle.

I.2.4 Des cas plus généraux

Voyons comment les idées présentées dans cette partie peuvent être prolongées dans des contextes plus généraux.

I.2.5 $n > 1$ Variables dépendantes, et 1 variable indépendante

Nous considérons maintenant le cas $y = (y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x))$. L'objectif est de trouver $y(x)$ de telle sorte que $\delta I[y] = 0$, où

$$I[y] = \int_a^b F(x, y, y') dx, \quad (\text{I.34})$$

Pour les variations δy qui laissent les points d'extrémité fixés, à savoir $y(a)=\text{fixe}$, $y(b) =\text{fixe}$. Une extension triviale de la précédente analyse fournit un ensemble de n équations d'Euler-Lagrange, donnée par

$$\frac{\delta F}{\delta y_i} = \frac{\partial F}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial y_i'} = 0. \quad (\text{I.35})$$

En outre, si F est indépendante de x , alors on obtient une quantité conservée (intégrale première), donnée par

$$F - \sum_{i=1}^n y_i' \frac{\partial F}{\partial y_i'} = \text{constant} \quad (\text{I.36})$$

I.2.5.1 Plusieurs variables indépendantes, et 1 variable dépendante

Ici, I est défini comme une intégrale sur une surface, sur un volume, ou sur hyper surface de dimension supérieure. Par exemple

$$I[u] = \int_V dV F(x, u, \nabla u). \quad (\text{I.37})$$

Nous cherchons $\delta I = 0$ les variations de u qui laissent les valeurs de u sur la frontière, $S=\partial V$, fixes. Encore une fois, on applique les notions variationnelles, nous obtenons n équations d'Euler-Lagrange séparables:

$$\frac{\partial F}{\partial u} - \frac{d}{dx_i} \frac{\partial F}{\partial u_i} = 0, \quad (\text{I.38})$$

où $u_i = \partial u / \partial x_i$.

I.3 Principe variationnel quantique : Méthode de Ritz

Supposons qu'on nous demande de calculer les niveaux énergétiques pour une particule dans un potentiel donné, et supposons également que nous ne sommes pas capables de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger des états stationnaires. Cependant, on peut estimer approximativement les valeurs propres avec une méthode variationnelle due à Walter Ritz.

La base de la méthode de Ritz est l'inégalité suivante:

$$E_0 \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \quad \forall |\psi\rangle, \quad (\text{I.39})$$

où E_0 est l'énergie de l'état fondamental, $|\psi\rangle$ est un état normalisé arbitraire et H est l'opérateur hamiltonien. Si on pouvait essayer toutes les fonctions d'onde, on pourrait identifier celle de l'état fondamental, mais malheureusement ce procédé n'est pas réalisable facilement. Toutefois, on peut se contenter d'explorer une région limitée de l'espace des fonctions d'onde au moyen d'une fonction test.

Par exemple, considérons le potentiel

$$V(x) \stackrel{\text{def}}{=} \lambda|x|. \quad (\text{I.40})$$

Comme fonction test, on se laisse inspirer par l'oscillateur harmonique et on choisit une gaussienne :

$$\psi(x, \sigma) = (\sigma\sqrt{\pi})^{-1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right). \quad (\text{I.41})$$

La gaussienne est normalisée et dépend du paramètre libre σ . La méthode de Ritz consiste à déterminer la valeur de σ qui minimise la valeur du fonctionnel

$$\begin{aligned} \langle E \rangle(\sigma) &\stackrel{\text{def}}{=} \langle \psi | H | \psi \rangle \\ &= \int \psi^*(x, \sigma) H \psi(x, \sigma) dx. \end{aligned} \quad (\text{I.42})$$

I.3.1 Energie cinétique

Considérons séparément l'énergie cinétique et l'énergie potentielle:

$$\langle E \rangle(\sigma) = \langle T \rangle(\sigma) + \langle V \rangle(\sigma) \quad (\text{I.43})$$

explicitement on a,

$$\langle T \rangle(\sigma) = -\frac{\hbar^2}{2m\sigma\sqrt{\pi}} \int \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \frac{d^2}{dx^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx. \quad (\text{I.44})$$

On peut manipuler l'intégrale de la façon suivante:

$$\begin{aligned} \int \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \frac{d^2}{dx^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx &= - \int \left[\frac{d}{dx} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \right]^2 dx \\ &= -\frac{1}{\sigma^4} \int x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx. \end{aligned} \quad (\text{I.45})$$

En utilisant que

$$\int \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) dx = \sigma\sqrt{\pi}; \quad (\text{I.46})$$

et en appliquant la règle d'intégration par parties, on trouve

$$\frac{2}{\sigma^2} \int x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) dx = \sigma\sqrt{\pi}, \quad (\text{I.47})$$

ou encore

$$\int x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) dx = \frac{\sigma^3\sqrt{\pi}}{2}, \quad (\text{I.48})$$

L'énergie cinétique moyenne est donc

$$\langle T \rangle(\sigma) = \frac{\hbar^2}{4m\sigma^2}. \quad (\text{I.49})$$

I.3.2 Energie potentielle

On peut obtenir l'énergie potentielle moyenne par la relation intégrale suivante

$$\langle V \rangle(\sigma) = \frac{\lambda}{\sigma\sqrt{\pi}} \int |x| \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) dx \quad (\text{I.50})$$

La valeur absolue peut être évitée si on utilise la parité de la fonction et l'intégrale peut s'écrire comme

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x| \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) dx = 2 \int_0^{\infty} x \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) dx. \quad (\text{I.51})$$

1.3.3 Minimisation de la fonctionnelle énergie

L'énergie est considérée comme une fonctionnelle et on peut écrire

$$\langle E \rangle(\sigma) = \frac{\hbar^2}{m4\sigma^2} + \frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}. \quad (\text{I.52})$$

La méthode de Ritz, peut s'appliquer en cherchant le minimum de la fonctionnelle énergie en fonction des paramètres variationnels libres de la fonction test. On a un seul paramètre à varier(σ).

$$\frac{d}{d\sigma} \langle E \rangle(\sigma) = -\frac{\hbar^2}{2m\sigma^3} + \frac{\lambda}{\sqrt{\pi}} = 0; \quad (\text{I.53})$$

Le minimum est réalisé pour la valeur particulière suivante

$$\sigma_0 = \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 \sqrt{\pi}}{2m\lambda}} \quad (\text{I.54})$$

Il suffit de remplacer cette valeur dans l'énergie de l'état fondamental et on aura finalement

$$E_0 = \langle E \rangle(\sigma) = \sqrt[3]{\frac{27\lambda^2 \hbar^2}{16\pi m}} \quad (\text{I.55})$$

Chapitre II

L'approche variationnelle

II.1 Description

Dans le cas de la loi de la réfraction, la trajectoire du rayon lumineux était déterminée par la valeur de x qui minimise une fonctionnelle $T(x)$. En général, c'est toute une Fonction (par exemple une trajectoire) que l'on recherche.

Par exemple, quel est le plus court chemin entre deux points A et B d'un plan ?

En notant s l'abscisse curviligne le long d'un chemin, on a

$$ds = \sqrt{dx^2 + dy^2} = \sqrt{1 + y'^2} dx, \quad (\text{II.1})$$

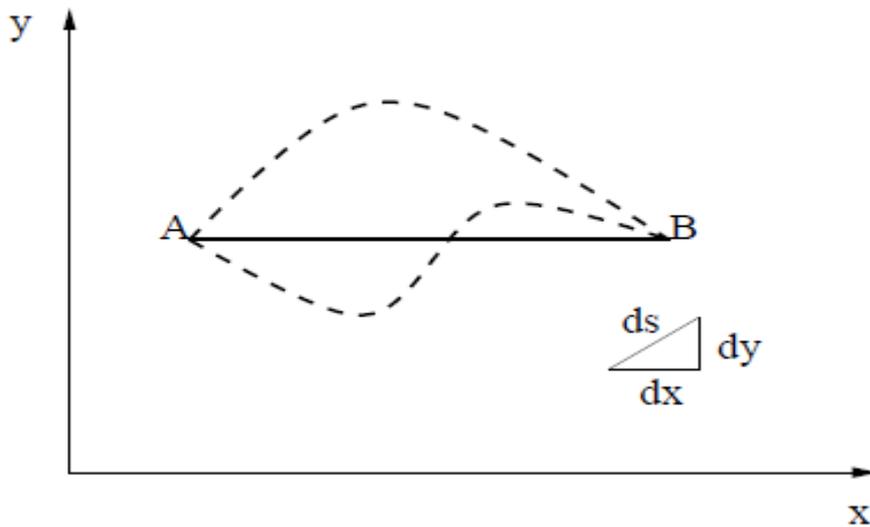


Fig. II.1 Le chemin le plus court entre deux points A et B .

où $y'(x) = \frac{dy}{dx}$. La longueur l du chemin est donnée par

$$l[y] = \int_A^B ds = \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{1 + y'^2} dx. \quad (\text{II.2})$$

On cherche donc la fonction $y(x)$ qui rend l'intégrale $l[y]$ minimale telle que

$$y(x_A) = y(x_B) = cte.$$

La réponse est bien sûr $y(x) = cte$, mais comment le démontrer ?

Comme nous le verrons plus loin, un autre exemple plus intéressant est celui de la courbe brachistochrone qui est la trajectoire qui minimise le temps de parcours entre deux points dans le champ de pesanteur.

II.1.1 Equation d'Euler-Lagrange

II.1.1a Notion de fonctionnelle

La fonctionnelle est une généralisation de la fonction. Plutôt que de dépendre d'une (ou plusieurs) variable, une fonctionnelle dépend d'une (ou plusieurs) fonction, elle même dépendant d'une (ou plusieurs) variable [7-17]. C'est donc une "fonction de fonction".

Considérons une fonction $y(x)$ dépendant d'une variable x et une fonction f à trois variables non indépendantes $f(y(x), y'(x), x)$, où $y'(x) = \frac{dy}{dx}$. La fonction $y(x)$ étant connue, la fonction f prend donc une valeur déterminée pour une valeur de x donnée. Nous verrons que la dépendance en la dérivée intervient fréquemment, en particulier en mécanique.

Remarquons que la fonction f dépend de x explicitement, mais aussi implicitement à travers $y(x)$ et $y'(x)$. La dérivée totale de f par rapport à x est

$$\frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} + \frac{\partial f}{\partial y'} \frac{dy'}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} y' + \frac{\partial f}{\partial y'} y'' \quad (\text{II.3})$$

Définissons la fonctionnelle $S[y]$ par l'intégrale :

$$S[y] = \int_{x_1}^{x_2} f(y(x), y'(x), x) dx. \quad (\text{II.4})$$

La fonctionnelle $S[y]$ est donc un nombre qui dépend de la fonction $y(x)$. L'approche variationnelle va nous permettre de déterminer la fonction $y(x)$ telle que $S[y]$ soit stationnaire (extrémale), sachant que $y(x_1)$ et $y(x_2)$ sont données. Nous allons montrer que la fonction $y(x)$ qui remplit cette condition doit vérifier l'équation d'Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'} = 0. \quad (\text{II.5})$$

II.1.1b Démonstration de l'équation d'Euler-Lagrange

Supposons que l'on connaisse la fonction $y_0(x)$, qui rend S extrémale. Puisque $S[y_0]$ est stationnaire, une petite variation $\eta(x)$ de la fonction $y(x)$ implique une variation $\delta S = 0$ au premier ordre en $\eta(x)$. Posons explicitement

$$y(x) = y_0(x) + \eta(x), \quad (\text{II.6})$$

$\forall x, \eta(x) \ll y_0(x)$ et calculons la variation induite de la fonctionnelle pour une valeur de x fixée

$$\delta S = \int_{x_1}^{x_2} [f(y_0(x) + \eta(x), y_0'(x) + \eta'(x), x) - f(y_0(x), y_0'(x), x)] dx. \quad (\text{II.7})$$

Au premier ordre en $\eta(x)$ et en $\eta'(x)$, on a

$$f(y_0(x) + \eta(x), y_0'(x) + \eta'(x), x) \simeq f(y_0(x), y_0'(x), x) + \frac{\partial f}{\partial y} \eta(x) + \frac{\partial f}{\partial y'} \eta'(x). \quad (\text{II.8})$$

Donc

$$\delta S = \int_{x_1}^{x_2} \left[\eta(x) \frac{\partial f}{\partial y} + \eta'(x) \frac{\partial f}{\partial y'} \right] dx. \quad (\text{II.9})$$

En intégrant par parties la seconde intégrale, on obtient

$$\delta S = \int_{x_1}^{x_2} \left[\eta(x) \frac{\partial f}{\partial y} - \eta(x) \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'} \right] dx + \left[\eta(x) \frac{\partial f}{\partial y'} \right]_{x_1}^{x_2}. \quad (\text{II.10})$$

Puisque $y(x_1)$ et $y(x_2)$ sont fixées, $\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0$ et le dernier terme de l'équation s'annule. Il reste :

$$\delta S = \int_{x_1}^{x_2} \eta(x) \left[\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'} \right] dx. \quad (\text{II.11})$$

Comme $\delta S = 0$, quelle que soit $\eta(x)$ on doit avoir

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'} = 0. \quad (\text{II.12})$$

C'est l'équation d'Euler-Lagrange, qui s'écrit plus explicitement

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\partial^2 f}{\partial y' \partial x} - \frac{\partial^2 f}{\partial y' \partial y} y' - \frac{\partial^2 f}{\partial y'^2} y'' = 0. \quad (\text{II.13})$$

Reprenons l'exemple du chemin le plus court

$$l[y] = \int_{x_A}^{x_B} f(y') dx, \quad (\text{II.14})$$

où $f(y') = \sqrt{1 + y'^2}$ avec $y(x_A) = y(x_B) = cte$. Puisque f ne dépend pas de y , on a d'après l'équation d'Euler:

$$\frac{\partial f}{\partial y'} = \frac{y'}{\sqrt{1+y'^2}} = c, \quad (\text{II.15})$$

où c est une constante. On trouve donc $y' = cte$, autrement dit, l'équation d'une droite qui passe par les points A et B . Dans cet exemple la réponse était évidente, mais l'approche variationnelle est très utile lorsque l'espace-temps est doté d'une métrique plus complexe.

II.2 Application

- L'oscillateur harmonique

Pour l'oscillateur harmonique classique, le lagrangien du système est

$$L = T - U, \quad (\text{II.16})$$

où T est l'énergie cinétique et U l'énergie potentielle. Le but est de le terminer l'équation de mouvement d'une masse m effectuant des oscillations.

Le Lagrangien s'écrit :

$$L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - \frac{1}{2} k q^2 \quad (\text{II.17})$$

et

$k = m\omega^2$, et q désigne la variable position

On utilise l'équation d'Euler Lagrange:

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0.$$

on trouve l'équation différentielle du mouvement de la masse m

$$-m\omega^2 q - m\ddot{q} = 0.$$

On en déduit l'équation du mouvement :

$$\ddot{q} + \omega^2 q = 0.$$

Chapitre III

Étude de l'équation de Schrödinger

III.1 Equation de Schrödinger dans un potentiel central :

Le mouvement d'une particule plongée dans un potentiel central $V(r)$, qui ne dépend que de la distance r à l'origine des coordonnées, est invariant pour toute rotation et nous dirons que ce mouvement possède la symétrie sphérique, est décrit par l'équation de Schrödinger de la forme [18-27]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \Delta + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (\text{III.1})$$

D'après ce qui précède le Laplace Δ s'écrit en coordonnées sphériques sous la forme

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

Le moment cinétique orbital a pour forme

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (\text{III.3})$$

Où L^2 est le moment cinétique orbital, ainsi Δ est exprimé en terme de L par la relation

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \quad (\text{III.4})$$

Les fonctions propres de L^2 sont des fonctions appelées, les harmonique sphériques $Y_l^m(\theta, \varphi)$, ayant pour valeurs propres $l(l+1)\hbar^2$ avec $l = 1, 2, \dots$ et m varie entre $-l$ et $+l$, il ne faut pas confondre le nombre quantique m de $Y_l^m(\theta, \varphi)$ avec la masse m de H . On a alors

$$L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (\text{III.5})$$

Ainsi l'équation de Schrödinger prend la forme suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r) \quad (\text{III.6})$$

III.1.1 Equation radiale :

L'équation radiale est donnée par la relation (1.18) qui est

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r) \quad (\text{III.7})$$

Nous réécrivons l'équation (1.19) sous la forme:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] R_{n,l}(r) = E_{n,l} R(r) \quad (\text{III.8})$$

Maintenant posons $S_{n,l}(r) = rR_{n,l}(r)$, (les indices n et l sont les nombres quantiques, sont introduits dans la fonction $R(r)$ et dans l'énergie E) et en multipliant les deux membres de l'équation (1.20) par r , on obtient pour $S_{n,l}(r)$ l'équation différentielle suivante

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] S_{n,l}(r) = E_{n,l} S(r) \quad (\text{III.9})$$

Cette équation est très analogue à celle que l'on aurait à résoudre si, dans un problème à une dimension, une particule de masse m était assujettie à se déplacer dans un potentiel effectif $V_{eff}(r)$ tel que:

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)$$

III.1.2 Les solutions au voisinage de l'origine

Nous avons déjà signalé plus haut qu'il est nécessaire d'examiner le comportement à l'origine $r \rightarrow 0$ des solutions $R(r)$ de l'équation radiale (1.19). 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 $\frac{1}{r}$, $\left[\lim_{r \rightarrow 0} V(r)r^2 = 0 \Rightarrow V(r \rightarrow 0) = \frac{1}{r^\alpha}; \alpha < 2 \right]$

Considérons alors une solution de (III.9) et supposons qu'elle se comporte à l'origine comme r^ν

$$S_{n,l}(r)_{r \rightarrow 0} = cr^\nu. \quad (\text{III.10})$$

En reportant (III.10) dans (III.9), et en égalant à zéro le coefficient du terme dominant, on obtient l'équation :

$$-\nu(\nu + 1) + l(l + 1) = 0$$

Ou encore

$$\nu = l$$

$$\nu = -(l + 1)$$

Pour une valeur donnée de $E_{n,l}$, on peut donc trouver deux solutions linéairement indépendantes de l'équation. Les solutions acceptables de l'équation s'annulent à l'origine quel que soit l , puisque

$$S_{n,l}(r)_{r \rightarrow 0} = cr^{l+1}. \quad (\text{III.11})$$

Conjointement, il faut ajouter à l'équation la condition

$$S_{n,l}(0) = 0 \quad (\text{III.12})$$

Les fonctions $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ (ici les n, l, m sont ajoutés à la fonction totale $\psi(r, \theta, \varphi)$) doivent être de carré sommables, c'est-à-dire normalisables

$$\int |\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \partial r \partial \Omega = 1 \quad (\text{III.13})$$

Et s'écrivent comme un produit $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$, on a alors

$$\int |\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \partial r \partial \Omega = \int_0^\infty r^2 |R_{n,l}(r)|^2 \partial r \int |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \partial \Omega.$$

Les harmoniques sphériques $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont normées de sorte que (III.13) devient

$$\int_0^\infty |S_{n,l}(r)|^2 dr = 1$$

Finalement, les fonctions propres de l'Hamiltonien H d'une particule plongée dans un potentiel central $V(r)$ dépendent d'au moins trois indices: $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$ est simultanément fonction propre de H, L^2 et L_z avec les valeurs propres respectives $E_{n,l}, l(l+1)\hbar^2$ et $m\hbar$. n est appelé le nombre quantique radial, l le nombre quantique azimutal et m le nombre quantique magnétique.

La partie radiale de la fonction propre et la valeur propre $R_{n,l}(r) = \frac{1}{r} S_{n,l}(r)$ de la fonction propre et la valeur propre $E_{n,l}$ de H sont indépendantes du nombre quantique magnétique. La partie angulaire de la fonction propre ne dépend que de l et de m et non de n ; elle est la même quelle que soit la forme du potentiel $V(r)$.

III.1.3 Comportement asymptotique

On étudie les caractères généraux des solutions de l'équation (1.21). On pose alors $K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$,

L'équation devient

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} S_{n,l}(r) + K^2 S_{n,l}(r) = 0$$

Car $V(r)$ s'annule à l'infini et $\frac{l(l+1)}{r^2}$ tend vers 0, donc $S_{n,l}(r)$ se comporte à l'infini comme:

- Cas $n^\circ 1$: $S_{n,l}(r) = \exp(\pm iKr)$ si $E > 0$
- Cas $n^\circ 2$: $S_{n,l}(r) = \exp(\pm Kr)$ si $E < 0$

Dans le premier cas, on a $R_{n,l}(r) = \exp(\pm iKr)/r$ et on retrouve une onde sphérique divergente liée à un puits à l'origine et l'énergie est continue. On se trouve dans un état de diffusion. Dans le deuxième cas, on a $R_{n,l}(r) = \exp(\pm Kr)/r$. On trouve dans ce cas des

valeurs quantifiées de l'énergie; c'est un état lié et la solution exponentielle d'argument positif est à rejeter.

III.2 Méthode variationnelle semi-inverse :

Nous commençons avec l'équation de Schrödinger radiale pour un potentielle $V(r)$, ayant une symétrie sphérique c'est-à-dire, une particule se déplaçant sous l'influence d'un potentiel central, mais cet argument reste applicable aussi pour des interactions arbitraires.

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + (w(r) - E)R = 0 \quad (\text{III.14})$$

Où $w(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ est le potentiel effectif, l désigne le nombre quantique de moment angulaire, \hbar est appelé la constante de Planck (également connu sous le nom de la constante de Dirac), $m(E)$ est la masse (énergie) de la particule. Dans la section suivante, pour les exemples, $V(r)$ est pris pour être de type potentiel de Coulomb comme

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon r},$$

où Z est le nombre atomique, et e est la charge de la particule. Cependant, nous pouvons réécrire l'équation. (III.12) sous la forme

$$U(r; R; R'; R'') = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 R}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{mr} \frac{dR}{dr} + (w(r) - E)R = 0 \quad (\text{III.15})$$

Où les exposants $'$ et $''$ désignent les dérivées par rapport à r . La condition de consistance pour l'existence d'une intégrale fonctionnelle pour le cas unidimensionnel (1D), est donnée par

$$\frac{\partial U}{\partial R'} = \frac{d}{dr} \left(\frac{\partial U}{\partial R''} \right) \quad (\text{III.16})$$

Nous appliquons la condition de cohérence (III.16) à l'équation. (III.15), il est aisé de vérifier que cette condition n'est pas satisfaite. Par conséquent, nous utilisons un facteur $g(r)$ auxiliaire et réécrire l'équation. (III.15) en tant que :

$$Y(r; R; R'; R'') = g(r)U(r; R; R'; R'') = 0 \quad (\text{III.17})$$

et dans l'équation. (III.16), U est remplacé par Y . Maintenant la condition de cohérence est satisfaite à condition que $g(r) = r^2$.

Maintenant, l'équation différentielle (III.17) peut être dérivée à partir d'une fonction spécifique comme condition stationnaire. Pour trouver cette fonctionnelle, nous appliquons la méthode semi- inverse qui fournit jusqu'à présent la meilleure technique pour établir des principes variationnels pour de nombreux problèmes physiques. L'idée de base de la méthode semi- inverse est illustrée dans [28]. Nous construisons dans une forme alternative un processus général fonctionnel pour l'équation. (III.17) en tant que :

$$J(R) = \int_0^{+\infty} L dr \quad (\text{III.18})$$

Dans laquelle L est une fonction de Lagrange, qui se lit

$$L = a \frac{\hbar^2}{2m} \left(r \frac{dR}{dr} \right)^2 + b(w(r) - E)(rR)^2 + F \quad (\text{III.19})$$

Où F est une fonction inconnue de R et/ou ses dérivés, a et b sont des constantes arbitraires à déterminer. La condition de stationnarité de (III.19), donne l'équation suivante suivant le processus d'Euler

$$-a \frac{\hbar^2}{m} r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} - 2a \frac{\hbar^2}{m} r \frac{dR}{dr} + 2b(w(r) - E)r^2 R + \frac{\delta F}{\delta R} = 0 \quad (\text{III.20})$$

nous référons à $\delta F / \delta R$ comme la dérivée variationnelle de F par rapport à R , exprimée par

$$\frac{\delta F}{\delta R} = \frac{\partial F}{\partial R} - \frac{d}{dr} \left(\frac{\partial F}{\partial R'} \right) + \frac{d^2}{dr^2} \left(\frac{\partial F}{\partial R''} \right) - \dots \quad (\text{III.21})$$

Nous recherchons pour un tel F ; a et b de sorte que l'équation. (III.20) se révèle être l'équation d'origine. Maintenant, les inconnues F , a et b , peuvent être identifiées comme suit :

$$a = b = \frac{1}{2}, \quad F = 0 \quad (\text{III.22})$$

Enfin, nous obtenons le principe variationnel nécessaire de l'équation. (III.19), qui se lit

$$J(R) = \int_0^{+\infty} \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{dR}{dr} \right)^2 + (w(r) - E)R^2 \right\} r^2 dr \quad (\text{III.23})$$

Il peut être souvent très instructif d'examiner d'autres exemples qui peuvent être considérés du point de vue pédagogique comme un banc d'essai. Ce point est illustré dans le chapitre suivant.

Chapitre IV

Les applications

IV Applications

On expose brièvement la méthode variationnelle semi-inverse sur une forme différentielle générale [28-38]. Soit un système différentiel linéaire ou non linéaire quelconque suivant:

$$P(x, t, u, u_x, u_t, u_{xx}, u_{tt}, u_{xt}, \dots) = 0, \quad (\text{IV.1})$$

On construit une fonctionnelle d'essai $J(u)$ du problème (1) de la manière suivante

$$J(u) = \int_{\Omega} L(x, t, u, u_x, u_t, u_{xx}, u_{tt}, u_{xt}, \dots) d\Omega \quad (\text{IV.2})$$

où L est le Lagrangien du problème et exprimé par deux composantes comme:

$$L(x, t, u, u_x, u_t, u_{xx}, u_{tt}, u_{xt}, \dots) = L_1 + F(u) \quad (\text{IV.3})$$

L_1 est un Lagrangien connu d'une certaine partie du système (1), et $F(u)$ une fonction inconnue à déterminer. En minimisant la fonctionnelle comme une forme stationnaire $= 0$, il résulte l'opérateur d'Euler Lagrange:

$$\frac{\delta L}{\delta u} = \frac{\partial L}{\partial u} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} \right) + \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial L}{\partial u_{xx}} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} \right) + \dots = 0 \quad (\text{IV.4})$$

La relation (4) permet d'identifier $F(u)$ de telle manière qu'elle coïncide avec le problème d'origine (1). Ensuite on peut utiliser le problème de Ritz pour approcher la solution du système différentielle.

IV. 1 Le cas classique

On présente un test décrit par le système différentiel suivant

$$-\frac{d}{dx} (g(x)u_x) - \lambda u = 0 \quad (\text{IV.5})$$

avec les conditions aux limites: $u(0) = u(l) = 0$

La fonctionnelle d'essai peut être écrite de la manière suivante

$$J(u) = \int_{\Omega} L(x, u, u_x) d\Omega$$

où $L(x, u, u_x) = \frac{1}{2}g(x)(u_x)^2 + F(u)$

Maintenant, on utilise la forme stationnaire (IV.4) de sorte qu'on ait

$$\delta u: -\frac{d}{dx}(g(x)u_x) + \frac{\delta F}{\delta u} = -\frac{d}{dx}(g(x)u_x) - \lambda u$$

il s'ensuit que $\frac{\delta F}{\delta u} = -\lambda u$, on peut alors identifier $F = -\frac{1}{2}\lambda u^2 + a$, où a est une constante.

Enfin le Lagrangien du problème peut s'écrire comme

$$L(x, u, u_x) = \frac{1}{2}g(x)(u_x)^2 - \frac{1}{2}\lambda u^2 + a$$

Pour ce test, on va choisir une solution $u(x)$ de la forme: $u(x) = A \sin(\frac{\pi x}{l}) + Bx(x - l)$ et $g(x) = \beta$ est une constante. A et B sont des paramètres variationnels à déterminer.

Calculons maintenant la fonctionnelle suivante:

$$J(u) = \int_0^l \left(\frac{1}{2}g(x)(u_x)^2 - \frac{1}{2}\lambda u^2 + a \right) dx$$

On trouve:

$$J(A, B, \lambda) = al - \frac{1}{60}A^2l^3(-10\beta - l^2\lambda) + \frac{4ABl(-\pi^2\beta + l^2\lambda)}{\pi^3} + \frac{1}{4l}B^2(\pi^2\beta - l^2\lambda)$$

La condition de stationnarité implique que:

$$\begin{cases} \frac{\partial J}{\partial A} = 0 \\ \frac{\partial J}{\partial B} = 0 \\ \frac{\partial J}{\partial \lambda} = 0 \end{cases}$$

Il résulte que:

$$\begin{cases} -\frac{1}{30}A(-10l^3\beta + l^5\lambda) + \frac{4Bl(-\pi^2\beta + l^2\lambda)}{\pi^3} = 0 \\ \frac{1}{2l}B(\pi^2\beta - l^2\lambda) + \frac{4Al(-\pi^2\beta + l^2\lambda)}{\pi^3} = 0 \\ -\frac{B^2l}{4} - \frac{A^2l^5}{60} + \frac{ABl^3}{\pi^3} = 0 \end{cases}$$

La résolution du système algébrique fournit les paramètres variationnels possibles suivants:

$$\begin{cases} \lambda = \frac{\pi^2\beta}{l^2}, A = 0 \\ \lambda = \frac{\pi^2\beta}{l^2}, B = 0 \end{cases}$$

Les solutions montrent que dans la première variante B peut être obtenu par la voie de normalisation puisque c'est un problème aux valeurs propres lié à λ . La deuxième variante montre aussi que A peut être déduit par la voie de normalisation. Finalement les solutions sont:

$$\begin{cases} u(x) = B \sin\left(\frac{\pi x}{l}\right) \\ \lambda = \frac{\pi^2\beta}{l^2} \end{cases} \quad (a)$$

et

$$\begin{cases} u(x) = Ax(x-l) \\ \lambda = \frac{\pi^2\beta}{l^2} \end{cases} \quad (b)$$

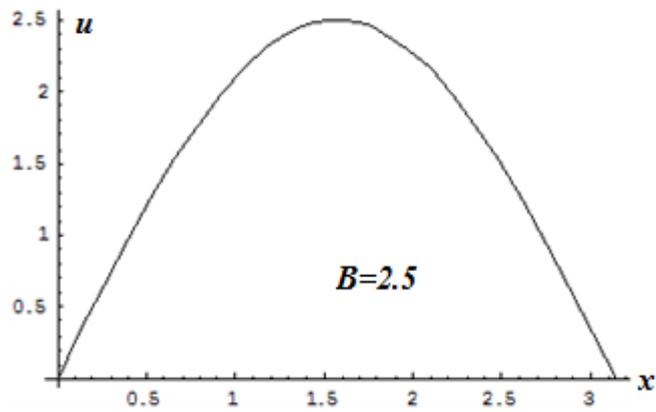


Figure (IV.1.1): Graphe de la fonction (a)

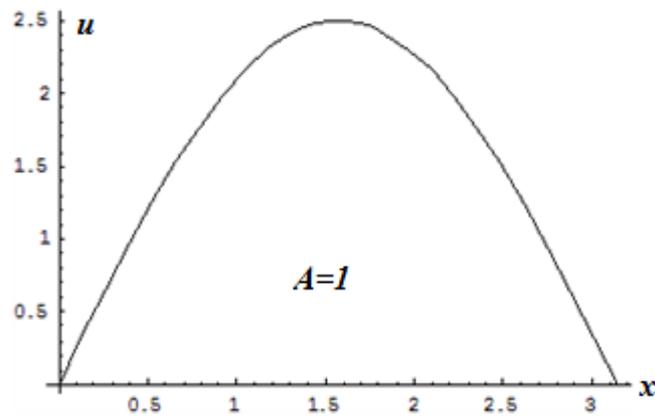


Figure (IV.1.2) : Graphe de la fonction (b)

IV. 2 Le cas quantique

L'équation de Schrödinger radiale indépendante du temps peut s'écrire après des manipulations comme

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + (W(r) - E)R(r) = 0$$

$W(r)$ est le potentiel effectif central du problème $W(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)$ et $R(r)$ est la fonction d'onde radiale. m est la masse du système, $V(r)$ est le potentiel radial du système, l est le nombre quantique du moment angulaire, \hbar et la constante de Planck et $m(E)$ est la masse (énergie) de la particule.

L'équation précédente est mise sous la forme suivante:

$$U(r, R, R_r, R_{rr}) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 R}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{mr} \frac{dR}{dr} + (W(r) - E)R(r) = 0$$

Pour pouvoir construire le Lagrangien du problème, on va tout d'abord vérifier si la forme précédente admet une formulation variationnelle. Nous allons utiliser la condition de consistence pour l'existence d'une intégrale fonctionnelle suivante

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{\partial U}{\partial R_{rr}} \right) = \frac{\partial U}{\partial R_r}$$

En appliquant cette condition, nous constatons qu'elle n'est pas satisfaite. Dans ce cas, on procède à une certaine transformation comme

$$Y(r, R, R_r, R_{rr}) = g(r)U(r, R, R_r, R_{rr}) = 0$$

Il résulte que la fonction $g(r)$ est identifiée comme $g(r) = r^2$. Maintenant la théorie est prête à être utilisée. Pour application, nous allons prendre l'oscillateur harmonique isotrope radial qui s'écrit comme

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$$

La fonctionnelle d'essai peut être écrite de la manière suivante

$$J(R) = \int_0^\infty L(r, R, R_r) dr$$

$$\text{où } L(r, R, R_r) = \frac{\hbar^2}{4m} \left(r \frac{dR}{dr} \right)^2 + F(R)$$

Maintenant, on utilise la forme stationnaire (IV.4) de sorte qu'on ait

$$\delta R: -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\delta F}{\delta R} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + (W(r) - E)r^2 R = 0$$

il s'ensuit que $\frac{\delta F}{\delta R} = (W(r) - E)r^2 R$, on peut alors identifier F comme:

$$F = -\frac{1}{2}(W(r) - E)r^2 R^2 + F_0, \text{ où } F_0 \text{ est une constante, qu'on pose égale à 0. Enfin le}$$

Lagrangien du problème peut s'écrire comme

$$L(r, R, R_r) = \frac{\hbar^2}{4m} \left(r \frac{dR}{dr} \right)^2 - \frac{1}{2}(W(r) - E)r^2 R^2$$

et le potentiel $(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$, alors le Lagrangien s'écrit:

$$L(r, R, R_r) = \frac{1}{4} \left[\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{dR}{dr} \right)^2 - \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^2} + m\omega^2 r^2 - 2E \right) R^2 \right] r^2$$

Pour ce test, on va choisir plusieurs variantes de fonctions d'essai qui renferment des paramètres variationnels se déduisant de la condition de stationnarité de la fonctionnelle $J(R)$. Nous adoptons le système d'unités atomique dans lequel $\hbar = m = 1$

Choix des fonctions d'essai

1. $R = ae^{-br^2}$

Avec Mathematica on obtient $J(a, b)$ en fonction des paramètres a, b , et l'énergie

$$J(a, b) = \frac{a^2 \sqrt{\frac{\pi}{2}} (12b^2 - 8bE + 3\omega^2)}{64b^{5/2}}$$

La condition de stationnarité fournit les expressions suivantes

$$\frac{\partial J(a,b)}{\partial a} = \frac{a \sqrt{\frac{\pi}{2}} (12b^2 - 8bE + 3\omega^2)}{32b^{5/2}} = 0$$

$$\frac{\partial J(a,b)}{\partial b} = \frac{a^2(24b-8b) \sqrt{\frac{\pi}{2}}}{64b^{5/2}} - \frac{5a^2 \sqrt{\frac{\pi}{2}} (12b^2 - 8bE + 3\omega^2)}{128b^{7/2}} = 0$$

La résolution du système algébrique fournit les valeurs de b et de E , la constante a peut être déterminée via la condition de normalisation $\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr$.

Toujours avec Mathematica on obtient:

$$b = \frac{\omega}{2} \quad \text{et} \quad E = \frac{3\omega}{2}$$

Ce résultat est exact puisque l'énergie de l'oscillateur harmonique isotrope 3D est donnée par la formule:

$$E = \left(n + \frac{3}{2} \right) \omega$$

avec $n = k + l$, où k est une quantité paire qui génère les différentes valeurs de l , par exemple:

- $n = 0: l = 0$
- $n = 1: l = 1$
- $n = 2: l = 0, 2$
- $n = 3: l = 1, 3$
- $n = 4: l = 0, 2, 4$

On peut commencer la référence = 1, dans ce cas l'énergie aura l'expression $E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \omega$.

La figure(IV.2.1) montre quelques valeurs de l'énergie en termes des valeurs quantiques l .

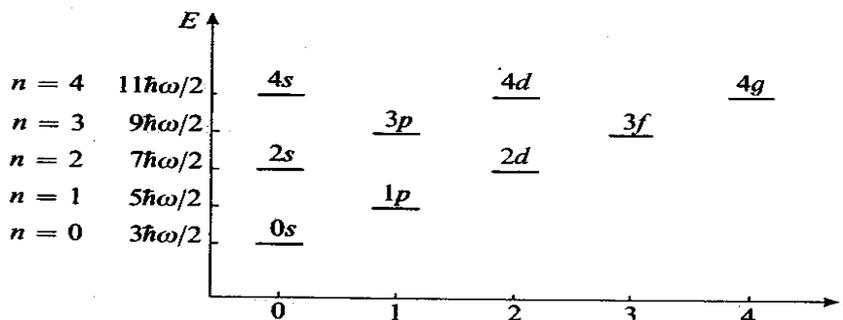


Figure (IV.2.1): Les énergies vs le nombre quantique l pour certaines configurations.

On déduit que ce résultat correspond à la configuration: $n = 0, l = 0$ (*état 0s*), puisque la fonction d'onde R_{nl} est donnée par

$$R_{00} = ae^{-\frac{\omega}{2}r^2}$$

Le graphe de la fonction d'onde R_{00} pour $a = 1, \omega = 1$ est représenté dans la figure (IV.2.2).

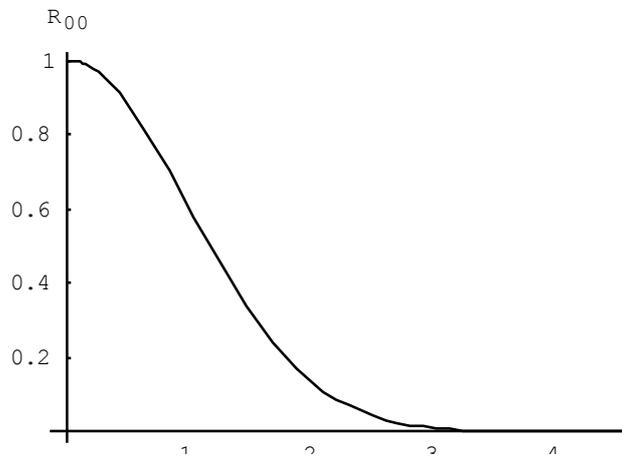


Figure (IV.2.2) : La fonction d'onde R_{00} pour $a = 1, \omega = 1$

2. $R = are^{-br^2}$

Avec Mathematica on obtient $J(a, b)$ en fonction des paramètres a, b , et l'énergie E

$$J(a, b) = \frac{3\sqrt{\frac{\pi}{2}}(20b^2 - 8bE + 5\omega^2)a^2}{256b^{7/2}}$$

La condition de stationnarité fournit les expressions suivantes

$$\frac{\partial J(a,b)}{\partial a} = \frac{3a\sqrt{\frac{\pi}{2}}(20b^2 - 8bE + 5\omega^2)}{128b^{7/2}} = 0$$

$$\frac{\partial J(a,b)}{\partial b} = \frac{3a^2(40b - 8E)\sqrt{\frac{\pi}{2}}}{256b^{7/2}} - \frac{21a^2\sqrt{\frac{\pi}{2}}(20b^2 - 8bE + 5\omega^2)}{512b^{9/2}} = 0$$

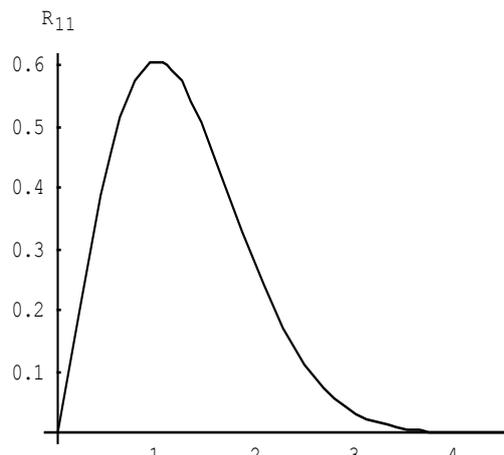
On obtient les résultats exacts suivants:

$$b = \frac{\omega}{2} \quad \text{et} \quad E = \frac{5\omega}{2}$$

On déduit que ce résultat correspond à la configuration: $n = 1, l = 1$ (*état 1p*), puisque la fonction d'onde R_{nl} est donnée par

$$R_{11} = ar e^{-\frac{\omega}{2}r^2}$$

Le graphe de la fonction d'onde R_{11} pour $a = 1, \omega = 1$ est représenté dans la figure (IV.2.3).



Figure(IV.2.3): La fonction d'onde R_{11} pour $a = 1, \omega = 1$

$$3. R = (c + ar^2)e^{-br^2}$$

Avec Mathematica on obtient $J(a, b, c)$ en fonction des paramètres a, b, c et l'énergie E

$$J(a, b, c) = \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{\frac{\pi}{2}} (16b^2c^2(12b^2 - 8bE + 3\omega^2) + 24abc(4b(b - 2E) + 5\omega^2) + 3a^2(44b^2 - 40bE + 35\omega^2))}{512b^{9/2}} \right)$$

La condition de stationnarité fournit les expressions suivantes

$$\frac{\partial J(a, b, c)}{\partial a} = \frac{1}{1024b^{9/2}} \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} (24bc(4b(b - 2E) + 5\omega^2) + 6a(44b^2 - 40bE + 35\omega^2)) \right) = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial J(a, b, c)}{\partial b} &= \frac{1}{1024b^{9/2}} \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} (24abc(4b + 4(b - 2E)) + 3a^2(88b - 40E) \right. \\ &\quad + 16b^2c^2(24b - 8E) + 32bc^2(12b^2 - 8bE + 3\omega^2) \\ &\quad \left. + 24ac(4b(b - 2E) + 5\omega^2)) \right) \\ &\quad - \frac{1}{2048b^{11/2}} \left(9 \sqrt{\frac{\pi}{2}} (16b^2c^2(12b^2 - 8bE + 3\omega^2) + 24abc(4b(b - 2E) + 5\omega^2) \right. \\ &\quad \left. + 3a^2(44b^2 - 40bE + 35\omega^2)) \right) = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial J(a, b, c)}{\partial c} &= \frac{1}{1024b^{9/2}} \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} (32b^2c(12b^2 - 8bE + 3\omega^2) + 24ab(4b(b - 2E) + 5\omega^2)) \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

On obtient les résultats exacts suivants:

- Cas 1:

$$b = \frac{\omega}{2}, \quad a = 0 \quad \text{et} \quad E = \frac{3\omega}{2}$$

Cette variante correspond à la configuration trouvée dans le 1^{ier} choix, qui correspond $n = 0, l = 0$.

- Cas 2:

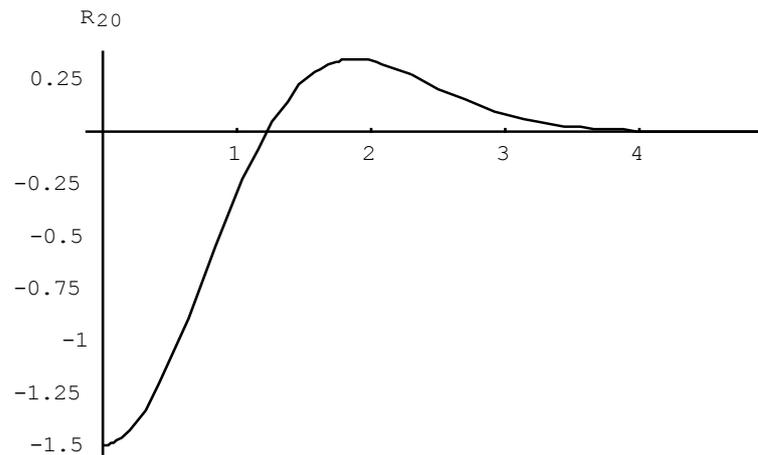
$$b = \frac{\omega}{2}, a = -\frac{2\omega}{3}c \text{ et } E = \frac{7\omega}{2}$$

On déduit que ce résultat correspond à la configuration: $n = 2, l = 0$ (état $2s$), puisque la fonction d'onde R_{nl} est donnée par

$$R_{20} = c \left(1 - \frac{2\omega}{3} r^2 \right) e^{-\frac{\omega}{2} r^2}$$

dans laquelle c est déduite par la condition de normalisation.

Le graphe de la fonction d'onde R_{20} pour $c = 1, \omega = 1$ est représenté dans la figure (IV.2.4).



Figure(IV.2.4): La fonction d'onde R_{20} pour $c = 1, \omega = 1$

$$4. R = ar^2 e^{-br^2}$$

Avec Mathematica on obtient $J(a, b)$ en fonction des paramètres a, b , et l'énergie E

$$J(a, b) = \frac{1}{2} a^2 \frac{15 \sqrt{\frac{\pi}{2}} (28b^2 - 8bE + 27\omega^2)}{512 b^{9/2}}$$

La condition de stationnarité fournit les expressions suivantes

$$\frac{\partial J(a, b)}{\partial a} = \frac{15a \sqrt{\frac{\pi}{2}} (28b^2 - 8bE + 7\omega^2)}{512 b^{9/2}} = 0$$

$$\frac{\partial J(a, b)}{\partial b} = \frac{15a^2 (56b - 8E) \sqrt{\frac{\pi}{2}}}{1024 b^{9/2}} - \frac{135a^2 \sqrt{\frac{\pi}{2}} (28b^2 - 8bE + 7\omega^2)}{2048 b^{11/2}} = 0$$

On obtient les résultats exacts suivants:

$$b = \frac{\omega}{2} \text{ et } E = \frac{7\omega}{2}$$

On déduit que ce résultat correspond à la configuration: $n = 2, l = 2$ (*état 2s*), puisque la fonction d'onde R_{nl} est donnée par

$$R_{22} = ar^2 e^{-\frac{\omega}{2}r^2}$$

Le graphe de la fonction d'onde R_{22} pour $a = 1, \omega = 1$ est représenté dans la figure (IV.2.5).

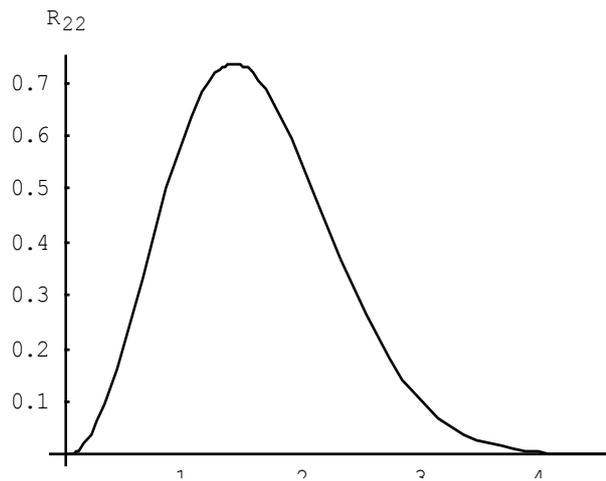


Figure (IV.2.5): La fonction d'onde R_{22} pour $a = 1, \omega = 1$

$$5. R = (ar^2 + c)r^3 e^{-br^2}$$

Avec Mathematica on obtient $J(a, b, c)$ en fonction des paramètres a, b, c et l'énergie E

$$J(a, b, c) = \frac{1}{65536^{15/2}} \left(105 \sqrt{\frac{\pi}{2}} (16b^2 c^2 (36b^2 - 8bE + 9\omega^2) + 72abc(28b^2 - 8bE + 11\omega^2) + 9a^2(284b^2 - 88bE + 143\omega^2)) \right)$$

La condition de stationnarité fournit les expressions suivantes

$$\frac{\partial J(a, b, c)}{\partial a} = \frac{105 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left((72bc(28b^2 - 8bE + 11\omega^2) + 18a(284b^2 - 88bE + 143\omega^2)) \right)}{65536^{15/2}} = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial J(a, b, c)}{\partial b} = & \frac{1}{65536^{15/2}} \left(105 \sqrt{\frac{\pi}{2}} (9a^2(568b - 88E) + 72abc(56b - 8E) \right. \\ & + 16b^2c^2(72b - 8E) + 32bc^2(36b^2 - 8bE + 9\omega^2) \\ & \left. + 72ac(28b^2 - 8bE + 11\omega^2)) \right) \\ & - \frac{1}{131072b^{17/2}} \left(1575 \sqrt{\frac{\pi}{2}} (16b^2c^2(36b^2 - 8bE + 9\omega^2) \right. \\ & \left. + 72abc(28b^2 - 8bE + 11\omega^2) + 9a^2(284b^2 - 88bE + 143\omega^2)) \right) = 0 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial J(a, b, c)}{\partial c} = \frac{105 \sqrt{\frac{\pi}{2}} (16b^2c(36b^2 - 8bE + 9\omega^2) + 72ab(28b^2 - 8bE + 11\omega^2))}{65536^{15/2}} = 0$$

On obtient les résultats exacts suivants:

- Cas 1:

$$b = \frac{\omega}{2} \text{ et } a = 0 \text{ et } E = \frac{9\omega}{2}$$

Cette variante correspond à la configuration trouvée dans le 1^{ier} choix, qui correspond $n = 0, l = 0$.

- Cas 2:

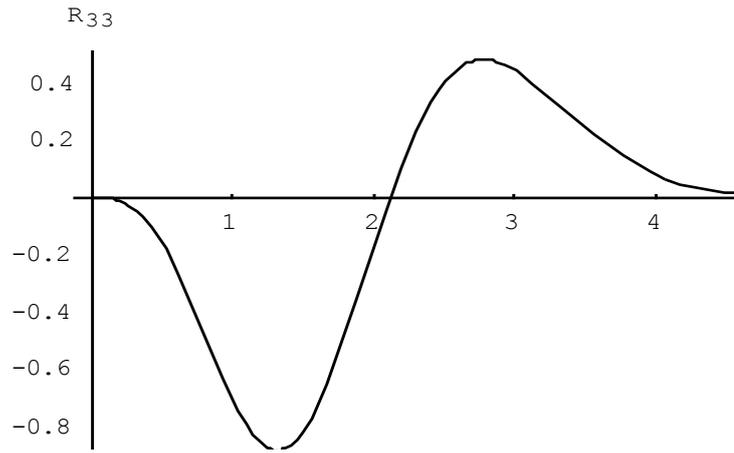
$$b = \frac{\omega}{2} \text{ et } a = -\frac{2\omega}{9}c \text{ et } E = \frac{13\omega}{2}$$

On déduit que ce résultat correspond à la configuration: $n = 3, l = 3$ (état 3s), puisque la fonction d'onde R_{nl} est donnée par

$$R_{33} = c \left(1 - \frac{2}{9}r^2 \right) r^3 e^{-\frac{\omega}{2}r^2}$$

dans laquelle c est déduite par la condition de normalisation $\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr$.

Le graphe de la fonction d'onde R_{33} pour $a = 1, \omega = 1$ est représenté dans la figure (IV.2.6).



Figure(IV.2.6): La fonction d'onde R_{33} pour $a = 1$, $\omega = 1$

Conclusion générale

Conclusion générale

L'objectif de ce mémoire est de donner une contribution à la physique des matériaux. Nous avons étudié dans ce travail, une nouvelle méthode variationnelle spécialement la méthode semi-inverse variationnelle. Nous sommes arrivés aux résultats corrects produits par un système classique et par l'image quantique dans le cadre de l'introduction de l'équation de Schrödinger. Le potentiel en 3D radial est utilisé dans le traitement de l'équation de Schrödinger en utilisant la méthode semi-inverse variationnelle. Nous avons testé quelques configurations des états et les énergies obtenues sont exactes. Un travail futur est envisagé et qui concerne le potentiel écranté qui de point de vue quantique est difficilement traitable.

Références bibliographiques

Références

- [1] J. Kevorkian and J. D. Cole, *Perturbation Methods in Applied Mathematics* ~Springer-Verlag, NY, 1981.
- [2] R. E. Mickens, *An Introduction to Nonlinear Oscillators* ~Cambridge University Press, Cambridge, 1981!.
- [3] R. Grimshaw, *Nonlinear Ordinary Differential Equations*, Applied Mathematical Texts and Engineering Science texts ~Blackwell Scientific Publications, Nottingham, Great Britain, 1990.
- [4] R. D. Benguria and M. C. Depassier, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2847 ~1996!.
- [5] R. D. Benguria and M. C. Depassier, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1171 ~1996!.
- [6] P. Vainshtein, G. Ziskind, and M. Fichman, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 551 ~1997!.
- [7] I. Anderson, Introduction to the variational bicomplex. www.math.usu.edu/fgmp/././IntroVariationalBicomplex.pdf.
- [8] Anderson I, Thompson G. The inverse problem of the calculus of variations for ordinary differential equations. *Mem Amer Math Soc* 1992;98(473).
- [9] H Bokhari A, Mahomed F, Zaman FD. Symmetries and integrability of a fourth-order Euler-Bernoulli beam equation. *J Math Phys* 2010;51:053517. 9pp.
- [10] Bureau FJ. Differential equations with fixed critical points. *Ann Math* 1964;66:1–116. IV.
- [11] C. Muriel and J. L. Romero, “New methods of reduction for ordinary differential equations,” *IMA Journal of Applied Mathematics*, vol. 66, no. 2, pp. 111–125, 2001.
- [12] G. Gaeta and P. Morando, “PDEs reduction and λ -symmetries,” *Note di Matematica*, vol. 23, no. 2, pp. 33–73, 2004/05.

- [13] G. Cicogna, G. Gaeta, and P. Morando, “On the relation between standard and μ -symmetries for PDEs,” *Journal of Physics A*, vol. 37, no. 40, pp. 9467–9486, 2004.
- [14] C. Muriel, J. L. Romero, and P. J. Olver, “Variational C^∞ -symmetries and Euler-Lagrange equations,” *Journal of Differential Equations*, vol. 222, no. 1, pp. 164–184, 2006.
- [15] G. Cicogna and G. Gaeta, “Noether theorem for μ -symmetries,” *Journal of Physics A*, vol. 40, no. 39, pp. 11899–11921, 2007.
- [16] B. van Brunt, *The Calculus of Variations*, Springer, 2003.
- [17] P. J. Olver, *Applications of Lie Groups to Differential Equations*, vol. 107, Springer, New York, NY, USA, 1986.
- [18] Zerarka A, Hassouni S, Saidi H, Boumedjane Y. Energy spectra of the Schrödinger equation and the differential quadrature method. *Commun Nonlin Sci Numer Simul* 2005;10(7):737–45
- [20] B. Nine, O. Haif-Khaif and A. Zerarka. The eigenenergies of the wave function through the non variational Galerkin-B-spline approach. *Applied Mathematics and Computation*: 178 (2006) 486.492.
- [21] Zerarka, K. Mahboub, *Physical Review C* 71,064609 (2005)
- [22] Zerarka and Y. Boumedjane, Potential Identification by Inverse Scattering. Theory. *Intern. Jour of Theor. Phys.* Issue 9, september (2002).
- [23] Zerarka, Y. Boumedjane, and J. Hans. Inverted potential by the phase-integral method: He-Na elastic scattering. *Phys. Rev. A* 66, 052717 (2002)
- [24] Zerarka and V. G. Foester. Transfer and excitation *Jour. Quant. Spect. Rad. Trans.* 86/2 (2004) 151-159.

- [25] Zerarka and A. Soukeur. A generalized quadratic integral..... *Comm. Nonl. Sc. Num. Sim. Vol 10*, (2005).
- [26] Zerarka and V. G. Foester. Separation method. *Comm. Nonl. Sc. Num. Sim. Vol 10*, (2005) .
- [27] Zerarka, S.Hassouni, H.Saidi and Y. Boumedjane. Energy spectra of the Schrödinger equation and the differential quadrature method. *Comm. Nonl. Sc. Num. Sim. Vol 10*, (2005).
- [28] He, J.-H., Semi-Inverse Method of Establishing Generalized Variational Principles for Fluid Mechanics with Emphasis on Turbomachinery Aerodynamics, *International Journal of Turbo & Jet-Engines*, 14(1997), 1, pp. 23-28
- [29] Liu Hong-Mei. The variational principle for Yang–Mills equation by the inverse method. *FACTA UNIVERSITATIS Series. Mech Automatic Control Robot* 2004;4(16):169–71.
- [30] Atherton RW, Homsy GM. *Stud Appl Math* 1975;54:31.
- [31] Bhutani OP, Sharma S. *Int J Eng Sci* 1979;17:475.
- [32] Hao TH. Search for variational principles in electrodynamics by Lagrange method. *Int J Nonlin Sci Numer Simul* 2005;6(2):209–10.
- [33] A. Zerarka, K. Libarir, A semi-inverse variational method for generating the bound state energy eigenvalues in a quantum system: The Schrödinger equation. *Commun Nonlinear Sci Numer Simulat*, 14 (2009) 3195–3199 (www.elsevier.com/locate/cnsns)
- [34] Zhou Xin-Wei. Variational theory for physiological flow. *Comput Math Appl* 2007;54(7–8).
- [35] He, J.-H., Asymptotic Methods for Solitary Solutions and Compactons, *Abstract and Applied Analysis*, 2012, 916793

[36] He, J.-H., Some Asymptotic Methods for Strongly Nonlinear Equations, *Int. J. Mod. Phys. B*, 20 (2006), 10, pp. 1141-1199

[37] He, J.-H., An Elementary Introduction to Recently Developed Asymptotic Methods and Nanomechanics in Textile Engineering, *International Journal of Modern Physics B*, 22 (2008), 21, pp. 3487-3578

[38] He, J.-H., Mo, L. F., Variational Approach to the Finned Tube Heat Exchanger Used in Hydride Hydrogen Storage System, *International Journal of Hydrogen Energy*, 38 (2013), 36, pp. 16177-16178

.

Résumé :

Dans ce travail nous avons introduit le formalisme variationnel pour chercher les solutions dans les cadres classique et quantique. Nous avons utilisé le développement variationnel classique ainsi que la nouvelle méthode semi inverse variationnelle dans le traitement des modèles différentiels . D'exacts résultats sont obtenus pour les deux cas envisagés.

ملخص

قمنا في هذا العمل بإدخال مبدأ التغيرات للبحث عن الحلول في إطار الصورة الكلاسيكية و الكوانتية. استعملنا تطور التغيرات الكلاسيكي و طريقة شبه عكسية التغيرات في معالجة نماذج تفاضلية. استخرجنا من خلال الحالتين المدروستين حلول صحيحة .