

N<sup>o</sup> d'ORDRE : 42/2011-M/PH

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEURE ET  
DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE  
« HOUARI BOUMEDIENE »  
FACULTE DE PHYSIQUE



**MEMOIRE**

*Présenté pour l'obtention du diplôme de MAGISTER*

**EN : PHYSIQUE**

*Spécialité : Physique Théoriques des basses et moyennes énergies*

*Par : MOUMENE Amine*

*Sujet*

**ÉTUDE DES ÉTATS LIÉS DES POTENTIELS  
D'ÉCRANTAGE DU TYPE EXPONENTIEL COULOMBIEN**

*Soutenu publiquement le 06/01/2011, devant le jury composé de :*

<i>Mr. M. FELLAH</i>	<i>Professeur à l'USTHB</i>	<i>Président</i>
<i>Mr. M. MOULAY</i>	<i>Directeur de recherche au CRNA</i>	<i>Directeur de mémoire</i>
<i>Mlle. N. H. ALLAL</i>	<i>Professeur à l'USTHB</i>	<i>Examineur</i>
<i>Mme. A. FRAHI. AMROUN</i>	<i>Professeur à l'USTHB</i>	<i>Examineur</i>
<i>Mr. A. SMIDA</i>	<i>Professeur à l'USTHB</i>	<i>Examineur</i>

# Remerciements

Je tiens à remercier Monsieur M. Moulay, Directeur de recherche au CRNA, pour son suivi, ses orientations pertinentes et ses précieux conseils et ce, tout au long de ce travail effectué sous sa direction.

Je remercie le Professeur Monsieur M. Fellah qui me fait l'honneur de présider le jury de soutenance.

Mes remerciements vont aussi aux professeurs : Mademoiselle N. H. Allal, Madame A. Frahi Amroun et Monsieur A. Smida, pour l'honneur qu'ils me font en participant au jury.

Mes plus vifs remerciements s'adressent aussi à mes chers amis qui n'ont jamais cessé de m'encourager et de me soutenir afin de mener à bien ce travail.

Enfin, je remercie tous les enseignants de Physique et en particulier ceux de Physique Théorique ainsi que ceux qui ont participé de près ou de loin à ma formation et à l'aboutissement de ce travail.

# Remerciements

Je tiens à remercier tous mes proches, ma famille et mes amis pour leur soutien moral durant toute la durée de mon travail.

# Sommaire

Introduction . . . . .	3
<b>Chapitre 1 : Quelques rappels sur les fondements de la mécanique quantique</b>	<b>6</b>
1.Introduction . . . . .	7
2.Quantification canonique . . . . .	9
2.1.Onde plane classique . . . . .	9
2.2.Règles de la quantification canonique . . . . .	11
3.Rappels des postulats . . . . .	11
<b>Chapitre 2 : Quelques méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger</b>	<b>17</b>
1.Les perturbations . . . . .	18
2.La méthode de Nikiforov Uvarov (NU) . . . . .	25
2.1.Formalisme de la méthode NU . . . . .	25
2.2.Application . . . . .	27
3.La méthode de la SuperSymétrie en mécanique quantique (SUSYQM) . . . . .	30
<b>Chapitre 3 : La résolution du problème pour différents potentiels</b>	<b>34</b>
1.Le formalisme . . . . .	35
1.1.Rappel des aspects mathématiques . . . . .	35
1.2.Aspects physiques . . . . .	37
2.Le potentiel d'Hulthèn . . . . .	39
3.Le potentiel ECSC (Exponential Cosine Screened Coulomb) . . . . .	44
4.Le potentiel PSEC (Partially Screening Exponential cosine Coulomb) . . . . .	46
5.Le potentiel de Woods Saxon . . . . .	47

<b>Chapitre 4 : Analyse des résultats</b>	<b>51</b>
1.Le potentiel de Hulthèn . . . . .	52
2.Le potentiel ECSC . . . . .	54
3.Le potentiel PSEC . . . . .	56
4.Le potentiel de Woods Saxon . . . . .	57
Conclusion générale . . . . .	58
<b>Bibliographie</b>	<b>61</b>

## Introduction

Ces deux dernières décennies, de nombreux travaux ont été consacrés à la résolution de l'équation de Schrödinger avec les différents potentiels et où différentes méthodes et approches ont été utilisées (potentiel d'Hulthén [1] avec la méthode variationnelle [2], la méthode des perturbations [3], le potentiel ECSC (Exponential Coulomb Screened Cosine) avec plusieurs méthodes [4–11], le potentiel de Woods Saxon [12] avec la SUSYQM (Super symétrie en mécanique quantique) [13, 14], NU (Nikiforov Uvarov) [15], etc...).

L'équation de Schrödinger est une équation aux dérivées partielles du second ordre d'une fonction d'onde dépendante ou indépendante du temps, dont les solutions varient selon le choix du potentiel  $V(\vec{r})$ . Cette équation s'écrit sous la forme suivante :

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}\right)^2\psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

C'est une équation fondamentale en physique quantique non relativiste. Elle décrit l'évolution spatiale et temporelle d'une particule massive non relativiste. Elle est née de la fusion des propriétés ondulatoires et corpusculaires de la matière.

En général, deux approches dans la résolution de l'équation de Schrödinger peuvent être considérées :

- Le cas non stationnaire (dépendant du temps (1)).
- Le cas stationnaire :  $H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$

Le cas stationnaire en soi se subdivise aussi en deux types de problèmes :

Le premier concerne la détermination des valeurs propres et fonctions propres correspondantes qui satisfont à la condition  $\psi(r)_{r\rightarrow\infty} = 0$ . Les valeurs propres sont discrètes et ont des valeurs bien déterminées :  $E_n$  (spectre énergétique).

Le second cas concerne les problèmes de diffusion (au sens anglo-saxon du terme scattering) [16]. A la différence du premier cas, ici les valeurs de l'énergie sont connues (données par les conditions de l'expérience). Ce cas concerne notamment les problèmes de diffusion où il s'agit de déterminer la section efficace qui est une grandeur physique correspondant à la probabilité d'interaction d'une particule lors d'une réaction donnée.

Notre travail est consacré à l'étude du problème aux valeurs et vecteurs propres.

Ces dernières années, un intérêt croissant est porté à la détermination des énergies et des fonctions d'onde pour les états stationnaires [2, 6, 17–19, 34–36, 41, 42]. L'équation de Schrödinger (non relativiste) a été pour la majorité des potentiels résolue dans le cas où le moment angulaire  $l$  est égale à zéro [1–15, 17–22, 28–30, 35, 36, 40–42].

Pour le cas où  $l$  est différent de zéro, différentes méthodes numériques et semi analytiques ont été développées pour décrire les résultats expérimentaux pour les différents potentiels comme la méthode variationnelle qui consiste à trouver des approximations pour l'état fondamental et quelques états excités en utilisant des fonctions d'essai dépendant d'un ou de plusieurs paramètres (potentiels d'Hulthén [2] et ECSC [6]), le développement en  $1/N$  qui comme son nom l'indique, consiste en un développement en puissance de  $1/N$  qui sera traité comme un paramètre petit (potentiels d'Hulthén [17] et ECSC [9]), la méthode des perturbations (potentiels d'Hulthén [3] et ECSC [4–7]), la méthode de Nikiforov et Uvarov (potentiels d'Hulthén [18] et de Woods Saxon [15] avec quelques approximations), la SuperSymétrie (potentiels d'Hulthén [19] et de Woods Saxon [13, 14] avec quelques approximations), etc...

Les trois dernières méthodes citées seront explicitées en détail dans le chapitre 2.

Les approches analytiques et semi analytiques du développement en  $1/N$ , Nikiforov Uvarov (NU), la mécanique quantique super symétrisée (SuSy) sont des méthodes assez récentes qui ont été développées pour la résolution de l'équation de Schrödinger, sans oublier bien sûr les approches numériques dont la plus connue est celle d'Ixaru [11].

Les potentiels étudiés dans ce travail sont les potentiels de type exponentiel-coulombien et d'écrantage (ECSC) qui sont utilisés dans de nombreux problèmes aux valeurs propres en physique nucléaire, atomique et physique des particules.

Excepté pour les états  $s$  ( $l = 0$ ) et pour des valeurs particulières de leurs paramètres, ces potentiels n'admettent pas en général de solutions analytiques exactes pour le cas où  $l \neq 0$ .

Notre mémoire est structuré comme suit :

Le premier chapitre porte sur la compréhension du cheminement qui a mené à la mécanique quantique en générale et à l'équation de Schrödinger en particulier, avec le rappel des postulats du formalisme dont fait partie l'équation de Schrödinger.

Le second chapitre est consacré à la formulation de quelques méthodes de résolution où on montrera leurs formulations et applications de manière générale : la méthode des perturbations, la méthode de Nikiforov et Uvarov (NU), et la Supersymétrie en mécanique quantique (Ces deux dernières sont assez récentes).

Dans le chapitre 3, nous explicitons l'approche proposée basée sur *le formalisme du développement en séries de puissances*, et ce, pour les potentiels de Hulthén, de Woods Saxon, ECSC (Exponential Cosine Screened Coulomb) et PSEC (Partially Screening Exponential Cosine). Cette approche a été déjà développée et appliquée sur les potentiels d'ECSC et de PSEC [40].

Elle est suivie par la présentation de nos résultats dans le chapitre 4 avec une comparaison avec ceux obtenus par le biais d'autres méthodes.

Enfin, une conclusion générale est proposée sur l'ensemble de notre travail.

## Chapitre 1 :

Quelques rappels sur les fondements  
de la mécanique quantique

## 1.Introduction

La physique quantique (fille de l'ancienne théorie des quanta), constitue l'un des piliers de la physique moderne. Cette dénomination s'oppose à celle de la physique classique, celle-ci échouant dans sa description du monde microscopique (atomes et particules) ainsi que dans celle de certaines propriétés du rayonnement électromagnétique.

En bref, en 1900, le physicien allemand Max Planck introduisit l'idée de quantification de l'énergie, afin de proposer une formule pour la dépendance en fréquence observée pour l'énergie émise par le corps noir. En 1905, Albert Einstein expliqua l'effet photoélectrique en postulant que la lumière, ou plus généralement toute radiation électromagnétique, peut être divisé en un nombre fini de « quanta d'énergie » qui sont des points localisés dans l'espace. Dans l'introduction de son article de mars 1905, Sur un point de vue heuristique concernant l'émission et la transformation de la lumière, Albert Einstein indiqua : « Selon le postulat que l'on peut consulter ici, lorsqu'un rayon de lumière est diffusé à partir d'un point, l'énergie n'est pas distribuée continûment sur des espaces toujours croissants, mais consiste en un nombre fini de quanta d'énergie qui sont localisés en des points de l'espace, se déplaçant sans être divisés, et qui peuvent être absorbés ou générés seulement comme un tout. »

Ce postulat a été considéré comme la phrase la plus révolutionnaire écrite par un physicien au cours du XXe siècle. Ces quanta d'énergie seront appelés plus tard « photons », terme introduit par Gilbert Newton Lewis en 1926. L'idée que chaque photon est équivalent à une énergie en termes de quanta est une découverte remarquable car elle supprimait la possibilité pour le rayonnement du corps noir d'atteindre une énergie infinie (phénomène de catastrophe ultraviolette), ce qui était possible s'il était explicité en termes d'ondes seulement. En 1913, Niels Bohr expliqua les raies spectrales de l'atome d'hydrogène, en utilisant de nouveau la quantification, dans son article de juillet 1913 « On the Constitution of Atoms and Molecules ».

Ces théories, bien que pertinentes, étaient strictement phénoménologiques : il n'existait pas de justification rigoureuse pour la quantification (à part la discussion dans l'article sur la théorie des quanta de 1912 d'Henri Poincaré). Elles sont connues sous la désignation d'ancienne théorie quantique.

L'expression « physique quantique » fut employée pour la première fois dans le Planck's Universe in Light of Modern Physics de Johnstone (1931).

En 1924, le physicien français Louis de Broglie proposa sa théorie d'ondes de matière en postulant que les particules pouvaient montrer des caractéristiques ondulatoires, et vice-versa pour la lumière. Cette théorie valable pour toute matière, était directement issue de la théorie de la relativité restreinte, mais n'était pas algébriquement maniable, notamment dans le cadre d'une interaction entre la particule et un champ de force.

Construite sur l'approche de de Broglie, les bases de la mécanique quantique moderne naquit en 1925, lorsque les physiciens allemands Werner Heisenberg et Max Born développèrent la mécanique matricielle et le physicien autrichien Erwin Schrödinger développa la mécanique ondulatoire et proposa l'équation dite de Schrödinger non-relativiste comme approximation à la généralisation de la théorie de de Broglie (voir Hanle (1977)). Erwin Schrödinger démontra par la suite que les deux approches étaient équivalentes.

Werner Heisenberg formula son principe d'incertitude en 1927, et l'interprétation de Copenhague commença à prendre forme à peu près à la même époque. À partir de 1926, avec l'équation de Klein-Gordon, puis avec l'équation de Dirac (1927) pour l'électron, commença le processus d'unification de la mécanique quantique et de la relativité restreinte. Cette dernière équation (de Dirac) permit la description relativiste de la fonction d'onde électronique que Schrödinger avait échoué à obtenir. Elle prédisait le spin électronique et conduisit Paul Dirac à postuler l'existence du positron. Il initia l'utilisation de la théorie de l'opérateur, y incluant l'influente notation bra-ket, comme décrite dans son livre de 1930. Dans la même période, le mathématicien hongrois John von Neumann formula la base mathématique rigoureuse pour la mécanique quantique comme théorie d'opérateurs linéaires sur des espaces de Hilbert.

Dès 1927, des essais furent effectués pour appliquer la mécanique quantique à des champs plutôt qu'à de simples particules, donnant naissance à ce qui est connu sous le nom générique de théorie quantique des champs. P.A.M. Dirac, W. Pauli, V. Weisskopf, et P. Jordan comptent parmi les pionniers de cette discipline. Cette voie de recherche atteint son apogée avec la formulation de l'électrodynamique quantique par R.P. Feynman, F. Dyson, J. Schwinger, et S.I. Tomonaga au cours des années 1940. L'électrodynamique quantique (QED), théorie quantique des électrons, positrons et du champ électromagnétique, sert de modèle de base pour des théories du champ quantique. La théorie de la chromodynamique quantique (QCD) fut énoncée au début des années 1960. La théorie que nous connaissons aujourd'hui fut formalisée par Politzer, Gross et Wilzcek en 1975. En se basant sur le travail pionnier de Schwinger, Higgs, Goldstone, Glashow, Weinberg et Salam montrèrent de manière indépendante comment la force nucléaire faible et l'électrodynamique quantique pouvaient être unifiées en la seule force électrofaible.

## 2. Quantification canonique

### 2.1. Onde plane classique

En physique classique, une onde plane progressive monochromatique de pulsation  $\omega$  se propageant dans la direction des  $\vec{r}$  positifs s'écrit comme suit :

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \quad (1.1)$$

où l'amplitude  $\psi_0$  est une constante.

La fonction  $\omega t - \vec{k}\vec{r}$  est appelée phase de l'onde. Chaque fois que la phase de l'onde change de  $2\pi$ , l'amplitude de l'onde fait un cycle complet d'oscillations. Si on fixe notre attention sur des points précis où la phase est constante de sorte que :

$$k.r - \omega t = \text{constante} \quad (1.2)$$

on verra qu'avec la variation temporelle, la position de  $r$  qui satisfait cette équation se déplace avec une vitesse  $v$ , appelée *vitesse de phase*. Ces points qui ont une phase constante définissent le *front d'onde*, d'où la vitesse de phase n'est que la vitesse à laquelle les fronts d'ondes se propagent. La vitesse de phase peut s'écrire en terme de  $k$  et  $\omega$  en utilisant la définition :

$$v = \nu\lambda = \frac{2\pi\nu\lambda}{2\pi} = \frac{\omega}{k} \quad (1.3)$$

On peut aussi l'obtenir en différenciant l'équation (1.2) :

$$k \frac{dr}{dt} = \omega \quad (1.4)$$

Comme la vitesse  $d\vec{r}/dt$  du front d'onde est parallèle à la direction de propagation, alors  $kv = \omega$ .

Comme la phase de l'onde est invariante même si on change de système inertiel, on a :

$$k' \cdot r' - \omega' t' = k \cdot r - \omega t \quad (1.5)$$

où  $k$ ,  $r$ ,  $\omega$ ,  $t$  et  $k'$ ,  $r'$ ,  $\omega'$ ,  $t'$  correspondent respectivement aux propriétés de l'onde dans les systèmes  $S$  et  $S'$ .

En utilisant l'équation (1.5), on peut obtenir les équations de transformations pour  $k'$  et  $\omega'$  en fonction de  $k$  et  $\omega$  et ce en faisant les *transformations de Lorentz* qui donnent :

$$\begin{aligned} k'_x &= \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \left( k_x - \frac{v\omega}{c^2} \right) && \text{pour l'axe (ox)} \\ k'_y &= k_y && \text{pour l'axe (oy)} \\ k'_z &= k_z && \text{pour l'axe (oz)} \\ \omega' &= \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (\omega - vk_x) && \text{pour l'axe temporel} \end{aligned}$$

Ces dernières équations sont comparables aux lois de transformation relativiste pour le moment cinétique et l'énergie d'une particule qui s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} p'_x &= \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \left( p_x - \frac{vE}{c^2} \right) \\ p'_y &= p_y \\ p'_z &= p_z \\ E' &= \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (E - vp_x) \end{aligned}$$

Ces équations de transformations suggèrent que le vecteur d'onde  $k$  et la fréquence angulaire  $\omega$  peuvent être étroitement liés au moment  $p$  et à l'énergie  $E$  de la particule. De ce fait, de Broglie associant dans l'effet photoélectrique, l'onde électromagnétique à un corpuscule appelé photon, aussi, si on considère qu'il y a un double aspect onde-corpuscule, nous aurons les deux équations suivantes :

$$p = \hbar k \quad E = \hbar \omega \quad (1.6)$$

Ces deux dernières relations sont appelées *relations quantiques de de Broglie*. Elles ont été vérifiées expérimentalement par la suite par Davisson et Germer (1927).

En les introduisant dans l'équation (1.1) on obtient :

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})} \quad (1.7)$$

En dérivant par rapport au temps, on a :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = E\psi(\vec{r}, t) \quad (1.8)$$

L'impulsion est déduite en appliquant le gradient :

$$-i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) = \vec{p} \psi(\vec{r}, t) \quad (1.9)$$

## 2.2. Règles de la quantification canonique

Par le biais du principe de correspondance, on obtient les relations suivantes :

1. A la coordonnée de position  $x^i$  est associé un opérateur de position  $\hat{x}^i$  tel que :

$$\hat{x}^i f(\vec{r}) = x^i f(\vec{r})$$

2. A la coordonnée d'impulsion  $p^i$  est associé un opérateur d'impulsion  $\hat{p}^i$  tel que :

$$\hat{p}^i f(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial f(\vec{r})}{\partial x^i}, \text{ soit : } \hat{p}^i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x^i}$$

3. A la variable énergie est associé l'opérateur de dérivation temporelle :

$$E f(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial f(\vec{r}, t)}{\partial t}, \text{ soit : } E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

## 3. Rappels des postulats

Du fait que la dualité onde-corpuscule aboutissait à des résultats concordant avec ceux obtenus expérimentalement, il devenait nécessaire de construire une base mathématique et introduire des postulats qui seraient la base de la mécanique quantique.

Sa formulation mathématique, dans son usage général, fait largement appel à la notation bra-ket de Dirac, qui permet de représenter de façon concise les opérations sur les espaces de Hilbert utilisés en analyse fonctionnelle. Cette formulation est souvent attribuée à John von Neumann.

Soit un espace séparable  $H$  de Hilbert. Les états sont les rayons projectifs de  $H$ . Un opérateur est une transformation linéaire d'un sous-espace dense de  $H$  vers  $H$ . Si cet opérateur est continu, alors cette transformation peut être prolongée de façon unique à une transformation linéaire bornée de  $H$  vers  $H$ . Par tradition, les observables sont caractérisées par des opérateurs.

Dans ce cadre, le principe d'incertitude d'Heisenberg devient un théorème au sujet des opérateurs non-commutatifs. En outre, on peut traiter des observables continues et discrètes où dans le cas continu, l'espace de Hilbert est un espace de fonctions d'onde de carré intégrables.

### Postulat 1 (définition de l'état quantique)

La connaissance de l'état d'un système quantique est complètement contenue, à l'instant  $t$ , dans un vecteur normalisable de l'espace des états  $H$ . Il est habituellement noté sous la forme d'un ket  $|\psi(t)\rangle$ .

### Postulat 2 (principe de correspondance)

À toute grandeur observable, par exemple la position, l'énergie ou le spin, correspond un opérateur hermitien linéaire agissant sur les vecteurs d'un espace de Hilbert  $H$ . Cet opérateur est nommé *observable*.

Les opérateurs associés aux propriétés observables sont définis par des règles de construction qui reposent sur un principe de correspondance.

### Postulat 3 (valeurs possibles d'une observable)

La mesure d'une grandeur physique représentée par l'observable  $A$ , ne peut fournir que l'une des valeurs propres de  $A$ .

Les vecteurs propres et les valeurs propres de cet opérateur ont une signification particulière : les valeurs propres sont les valeurs pouvant résulter d'une mesure réelle de cette propriété, les vecteurs propres étant l'état quantique du système résultant de cette mesure (voir postulat 5 : réduction du paquet d'onde). En utilisant la notation bra-ket, ce postulat peut s'écrire :

$$\hat{A}|\alpha_n\rangle = a_n|\alpha_n\rangle \quad (1.10)$$

où  $\hat{A}$ ,  $|\alpha_n\rangle$  et  $a_n$  désignent respectivement, l'observable, le vecteur propre et la valeur propre correspondante.

Les états propres de toute observable  $\hat{A}$  forment une base orthonormée dans l'espace de Hilbert.

Le vecteur  $|\psi(t)\rangle$  peut se décomposer de manière unique sur la base de ces vecteurs propres ( $|\phi_i\rangle$ ) :

$$|\psi(t)\rangle = c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle + \dots + c_n|\phi_n\rangle \quad (1.11)$$

#### Postulat 4 (postulat de Born)

La mesure d'une grandeur physique représentée par l'observable  $A$ , effectuée sur l'état quantique (normalisé)  $|\psi(t)\rangle$ , donne le résultat  $a_n$ , avec la probabilité  $P_n$  égale à  $|c_n|^2$ .

Le produit scalaire d'un état et d'un autre vecteur (qu'il appartienne ou non à  $H$ ) fournit une amplitude de probabilité, dont le carré correspond à une probabilité ou une densité de probabilité.

#### Postulat 5 (réduction du paquet d'onde)

Si la mesure de la grandeur physique  $A$ , à l'instant  $t$ , sur un système représenté par le vecteur  $|\psi\rangle$  donne comme résultat la valeur propre  $a_n$ , alors l'état du système est projeté sur le sous-espace propre associé à  $a_n$  :

$$|\psi'\rangle = \frac{\hat{P}_n|\psi\rangle}{\sqrt{P(a_n)}} \quad (1.12)$$

Où  $P(a_n)$  est la probabilité de trouver comme résultat la valeur propre  $a_n$  et où  $\hat{P}_n$  est l'opérateur projecteur défini par :

$$\hat{P}_n = \sum_{k=1}^{g_n} |u_{n,k}\rangle\langle u_{n,k}| \quad (1)$$

Avec  $g_n$  le degré de dégénérescence de la valeur propre  $a_n$  et les  $|u_{n,k}\rangle$  les vecteurs de son sous-espace propre.

#### Postulat 6 (évolution temporelle de l'état quantique)

Cette évolution est une représentation de la solution de l'équation de Schrödinger, elle fut élaborée par Erwin Schrödinger en 1925. C'est une équation fondamentale en physique quantique non relativiste. C'est une équation d'onde qui généralise l'approche de de Broglie faite en ce qui concerne les particules massives non relativistes soumises à une force dérivant d'une énergie potentielle, dont l'énergie mécanique totale est écrite comme :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (1.13)$$

Le succès de l'équation, déduite de cette extension par utilisation du principe de correspondance, fut immédiat quant à l'évaluation des niveaux quantifiés d'énergie de l'électron dans l'atome d'hydrogène, car elle permit d'expliquer les raies d'émission de l'hydrogène : séries de Lyman, Balmer, Brackett, Paschen, etc...

L'interprétation physique correcte de la fonction d'onde de Schrödinger ne fut donnée qu'en 1926 par Max Born. En raison du caractère probabiliste qu'elle introduisait, la mécanique ondulatoire de Schrödinger suscita initialement des réserves chez quelques physiciens de renom comme Albert Einstein.

Si nous considérons maintenant l'hamiltonien classique qui s'écrit comme :

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) = E \quad (1.14)$$

Il contient toute l'information nécessaire à l'étude classique de l'évolution dynamique du système via les équations canoniques de Hamilton, moyennant la donnée d'une condition initiale. À cette particule classique est associée une onde  $\psi(\vec{r}, t)$  dont on cherche l'équation d'évolution. D'après les règles de la quantification canonique, l'hamiltonien classique devient un opérateur :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \quad (1.15)$$

L'opérateur  $\vec{\nabla}^2$  est le Laplacien  $\Delta = \vec{\nabla}^2$ . L'équation classique de conservation de l'énergie :

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = E$$

donne, en multipliant de chaque côté par la fonction d'onde, l'équation de Schrödinger dépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (1.16)$$

Afin de simplifier les écritures, Dirac a introduit en 1925 une notation élégante, dérivée de la théorie mathématique des formes linéaires sur un espace vectoriel. Dans ce formalisme abstrait, les postulats de la mécanique quantique prennent une forme concise.

Avec cette nouvelle notation, l'équation (1.16) s'écrit :

$$\vec{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m} |\psi(t)\rangle + V(\hat{r}, t) |\psi(t)\rangle \quad (1.17)$$

L'équation de Schrödinger étant une équation aux dérivées partielles, on peut la réécrire de façon équivalente dans une base particulière de l'espace des états. Si on choisit par exemple la base  $|\vec{r}\rangle$  correspondant à la représentation de position définie par :

$$\hat{r} |\vec{r}\rangle = \vec{r} |\vec{r}\rangle$$

alors la fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t) \equiv \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle$  satisfait à l'équation (1.16).

Sous cette forme on voit que l'équation de Schrödinger fait intervenir des opérateurs linéaires, ce qui permet d'écrire la solution générique comme la somme des solutions particulières. Cette équation dans la grande majorité des cas, n'admet pas de solution analytique exacte. Sa résolution est approchée analytiquement et/ou numériquement.

Toute combinaison linéaire de solutions est solution de l'équation. Cela mène à favoriser la recherche des états qui sont propres à l'opérateur hamiltonien.

Ces états propres ainsi que leurs énergies associées fournissent l'état stationnaire solution de l'équation de Schrödinger :

$$|\psi_n(t)\rangle = |\varphi_n\rangle \exp\left(\frac{-iE_n t}{\hbar}\right).$$

Ces états sont donc solutions de l'équation aux états et valeurs propres :

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$$

qui porte le nom **d'équation de Schrödinger stationnaire**.

Les valeurs de l'énergie peuvent être discrètes comme les solutions liées d'un puits de potentiel (par ex. niveaux de l'atome d'hydrogène). Il en résulte une quantification des niveaux d'énergie, où il arrive souvent que plusieurs états  $|\varphi_n\rangle$  correspondent à une même valeur de l'énergie (niveaux d'énergie dégénérés). Elles peuvent aussi correspondre à un spectre continu comme les solutions libres d'un puits de potentiel.

Les propriétés de la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger sont les suivantes :

- L'équation de Schrödinger est une équation au premier ordre par rapport au temps. La connaissance de  $\psi(r, t = 0)$  suffit pour déterminer l'évolution de  $\psi(r, t)$ . En effet, dans l'approche probabiliste de Born,  $\psi$  permet de calculer la probabilité de trouver la particule autour de  $r$ . La connaissance seule de  $\psi(r, t = 0)$  doit donc suffire pour déterminer l'évolution.
- L'équation de Schrödinger est linéaire. Si  $\psi_1$  et  $\psi_2$  en sont des solutions, alors :

$$\psi_3(r, t) = \alpha\psi_1(r, t) + \beta\psi_2(r, t)$$

est aussi solution de l'équation de Schrödinger.

- La fonction d'onde  $\psi$  est dite normalisée si :

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3r \psi^* \psi = 1$$

Qui s'interprète comme étant la probabilité de trouver la particule dans un petit volume  $d^3r$  situé au voisinage du point  $\vec{r}$  de l'espace à l'instant  $t$ , et doit être nécessairement située dans l'espace entier.

- la condition de normalisation précédente impose que  $\psi$  soit de carré sommable. De plus, comme l'équation de Schrödinger fait intervenir la dérivée seconde à travers le laplacien  $\nabla^2$ , la fonction  $\psi$  et ses premières dérivées doivent être continues. Il y a donc de fortes restrictions sur la classe des fonctions  $\psi$ .

## Chapitre 2 :

# Quelques méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger

## Introduction

Dans le présent chapitre, nous présentons trois approches : la méthode basée sur *les perturbations*, la méthode de *Nikiforov Uvarov (NU)* et la *Supersymétrie en mécanique quantique (SUSYQM)*. L'utilisation de ces deux dernière est assez récente. Elles sont connues comme étant assez puissantes.

## 1. Les perturbations

En mécanique quantique, la théorie de la perturbation (ou théorie des perturbations) [20,21] est un ensemble de schémas d'approximations utilisés pour décrire un système quantique complexe de façon simplifiée. L'idée est de partir d'un système simple et d'appliquer graduellement un hamiltonien « perturbant » qui représente un écart léger par rapport à l'équilibre du système (perturbation). Si la perturbation n'est pas trop importante, les différentes quantités physiques associées au système perturbé (comme ses niveaux d'énergie et états propres) seront générés de manière continue à partir de ceux du système non perturbé. On peut donc étudier le premier à partir de la connaissance du second.

Au départ, la théorie de la perturbation était un outil important pour la description des systèmes quantiques réels, car trouver des solutions exactes à l'équation de Schrödinger pour des hamiltoniens de systèmes même modérément complexes peut s'avérer difficile. Les hamiltoniens pour lesquels on connaît des solutions exactes, comme celui de l'atome d'hydrogène, de l'oscillateur harmonique quantique et de la particule dans une boîte, sont trop idéalisés pour décrire de manière adéquate la plupart des systèmes réalistes. Dans la théorie de la perturbation, on peut utiliser les solutions connues de ces hamiltoniens simples pour générer des solutions pour une série de systèmes plus complexes. Ainsi, en ajoutant un potentiel électrique perturbateur au modèle quantique de l'atome d'hydrogène, on peut calculer les déplacements faibles des raies spectrales de l'hydrogène en raison de la présence d'un champ électrique (effet Stark).

Le traitement des problèmes de systèmes non-perturbatifs a été en partie facilité par l'essor des moyens de calcul modernes. Il est devenu (relativement) simple de trouver des solutions non-perturbatives pour certains problèmes, par le biais de méthodes comme la théorie de la fonctionnelle de la densité. Ces avancées ont particulièrement profité à la chimie quantique. Grâce aux puissants ordinateurs, les calculs en théorie de la perturbation atteignent de très hauts niveaux de précision, nécessaires et importants en physique des particules pour obtenir des résultats théoriques comparables à ceux de l'expérience.

## **Théorie de la perturbation indépendante du temps**

Dans cette section, nous traiterons de la théorie de la perturbation indépendante du temps. Cette théorie fut présentée dans un article [38] d'Erwin Schrödinger de 1926, peu après qu'il eut énoncé ses théories en mécanique ondulatoire. Dans cet article, il fait référence à un travail antérieur de Lord Rayleigh [39], qui étudia les vibrations harmoniques d'une corde perturbée par des petites inhomogénéités. C'est pourquoi cette théorie de la perturbation est parfois appelée théorie de la perturbation de Rayleigh-Schrödinger.

### **Corrections du premier ordre**

Soit un hamiltonien non perturbé  $H_0$ , qui est aussi considéré comme indépendant du temps. Il possède des niveaux d'énergie et états propres connus, déterminés par l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.1.1)$$

Pour simplifier, on postule que les énergies sont discrètes. Les exposants (0) indiquent que ces quantités sont associées au système non perturbé. On peut alors introduire une perturbation dans l'hamiltonien.

Soit  $V$  une petite perturbation physique c'est à dire un potentiel énergétique produisant un champ externe (donc  $V$  est formellement un opérateur hermitique). Soit  $\lambda$  un paramètre sans dimension pouvant prendre des valeurs allant continûment de 0 (pas de perturbation) à 1 (perturbation totale).

L'hamiltonien perturbé s'écrit :  $H = H_0 + \lambda V$

Les niveaux d'énergie et états propres de l'hamiltonien perturbé sont de nouveau donnés par l'équation de Schrödinger :

$$H|n\rangle = H_0|n\rangle + \lambda V|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (2.1.2)$$

Le but est d'exprimer  $E_n$  et  $|n\rangle$  en termes de niveaux d'énergie et d'états propres de l'ancien hamiltonien. Si la perturbation est suffisamment faible, on peut les écrire en séries entières de  $\lambda$  :

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ |n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

Où

$$E_n^{(k)} = \frac{1}{k!} \frac{d^k E_n}{d\lambda^k}$$

Et

$$|n^{(k)}\rangle = \frac{1}{k!} \frac{d^k |n\rangle}{d\lambda^k}$$

Lorsque  $\lambda = 0$ , on réduit les équations aux valeurs non perturbées, qui sont les premiers termes de chaque série. Lorsque la perturbation est faible, les niveaux d'énergie et les états propres ne devraient pas beaucoup différer de leurs valeurs non perturbées, et les termes devraient rapidement devenir plus petits au fur et à mesure que l'ordre augmente. Si l'on introduit ces séries dans l'équation de Schrödinger, on obtient :

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda V)(|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \dots + \lambda^q |n^{(q)}\rangle) &= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots) \\ &(|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \dots + \lambda^q |n^{(q)}\rangle) \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

Les modifications de formules induites par l'introduction de la perturbation ne sont pas exactes, mais peuvent conduire à des résultats corrects, tant que le paramètre de développement  $\alpha$  reste faible. Cependant, au-delà d'un certain ordre  $q \sim 1/\alpha$ , les résultats deviennent divergents au fur et à mesure que les séries générées divergent, leur développement étant asymptotique. Il existe des techniques pour les convertir en séries convergentes, comme par exemple, une méthode de perturbation variationnelle (qui convertit une série divergente en une série convergente avec un petit paramètre de développement).

Le développement de cette équation et la comparaison des coefficients de chaque puissance de  $\lambda$  conduit à un système d'équations d'ordre  $q$  au maximum. L'équation d'ordre 0 est tout simplement l'équation de Schrödinger pour des systèmes non perturbés.

L'équation au premier ordre est :

$$H_0|n^{(1)}\rangle + V|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle$$

que l'on multiplie par  $\langle n^{(0)}|$ . Le premier terme de gauche s'annule avec le premier terme de droite (l'hamiltonien non perturbé est hermitien). Cela conduit à la modification énergétique du premier ordre :

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \quad (2.1.5)$$

Ce résultat peut être interprété de la manière suivante : supposons qu'une perturbation soit appliquée, mais que l'on conserve le système dans l'état quantique  $|n^{(0)}\rangle$ , qui est un état quantique valide bien que ne correspondant plus à un état propre de l'hamiltonien. La perturbation fait que l'énergie moyenne de cet état croît de  $\langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle$ . Cependant, la modification réelle de l'énergie est légèrement différente, car l'état propre perturbé n'est pas exactement le même que  $|n^{(0)}\rangle$ . Les modifications qui s'ensuivent sont données par les corrections du deuxième ordre pour les valeurs et vecteurs propres. Avant de calculer les corrections à l'état propre d'énergie, on doit définir la question de la normalisation. On peut supposer  $\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle = 1$ , mais la théorie de la perturbation postule que :  $\langle n|n\rangle = 1$ . Il s'ensuit qu'au premier ordre en  $\lambda$ , on doit avoir  $\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + \langle n^{(1)}|n^{(0)}\rangle = 0$ .

Tant que la phase globale n'est pas déterminée en mécanique quantique, on peut postuler sans perte de sa généralité que  $\langle n^{(0)}|n \rangle$  est un réel pur.

Ainsi,  $\langle n^{(0)}|n^{(1)} \rangle = \langle n^{(1)}|n^{(0)} \rangle$ , et on en déduit :

$$\langle n^{(0)}|n^{(1)} \rangle = 0$$

Afin d'obtenir la correction du premier ordre de l'état propre d'énergie, on insère l'expression de la correction énergétique du premier ordre dans le résultat incluant les coefficients du premier ordre de  $\lambda$  indiqué plus haut. On utilise ensuite la résolution de l'identité,

$$\begin{aligned} V|n^{(0)} \rangle &= \left( \sum_{k \neq n} |k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)}| \right) V|n^{(0)} \rangle + (|n^{(0)} \rangle \langle n^{(0)}|) V|n^{(0)} \rangle \\ &= \sum_{k \neq n} |k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)}| V|n^{(0)} \rangle + E_n^{(1)} |n^{(0)} \rangle \end{aligned}$$

où  $|k^{(0)} \rangle$  est le complément orthogonal de  $|n^{(0)} \rangle$ . Ce qui donnera :

$$(E_n^{(0)} - H_0)|n^{(1)} \rangle = \sum_{k \neq n} |k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)}| V|n^{(0)} \rangle \quad (2.1.6)$$

Supposons pour le moment que le niveau d'énergie d'ordre zéro ne soit pas dégénéré, c'est-à-dire qu'il n'y ait pas d'état propre de  $H_0$  dans le complément orthogonal de  $|n^{(0)} \rangle$  d'énergie  $E_n^{(0)}$ . On multiplie alors par  $\langle k^{(0)}|$ , ce qui donne :

$$(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) \langle k^{(0)}|n^{(1)} \rangle = \langle k^{(0)}| V|n^{(0)} \rangle \quad (2.1.7)$$

et par conséquent le composant de la correction du premier ordre selon  $|k^{(0)} \rangle$  par le postulat donnera (du fait que  $E_n^{(0)} \neq E_k^{(0)}$  dans le cas non dégénéré) :

$$|n^{(1)} \rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle k^{(0)}| V|n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)} \rangle \quad (2.1.7)$$

La modification du premier ordre dans le nième ket propre de l'énergie possède une contribution des états propres de l'énergie  $k \neq n$ .

Chaque terme est proportionnel à l'élément de matrice  $\langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle$ , qui est une mesure indiquant le degré de mixture des états propres  $n$  et  $k$ . Chaque terme est également inversement proportionnel à la différence d'énergie entre les états propres  $k$  et  $n$ , ce qui signifie que la perturbation « déforme » l'état propre vers un développement plus important s'il existe plus d'états propres à des énergies proches. On voit aussi que l'expression est singulière si chacun de ces états possède la même énergie que l'état  $n$  (postulat de la non dégénérescence).

### Corrections du deuxième ordre

On peut trouver les dérivations d'ordres supérieurs par une méthode similaire, bien que les calculs deviennent plus compliqués avec la formulation employée. La condition de normalisation indique que  $2\langle n^{(0)}|n^{(2)}\rangle + \langle n^{(1)}|n^{(1)}\rangle = 0$ . Jusqu'au deuxième ordre, les expressions pour les énergies et les états propres (normalisés) sont :

$$\begin{aligned}
 E_n &= E_n^{(0)} + \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots \\
 |n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_{k \neq n} \sum_{l \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)}|V|l^{(0)}\rangle \langle l^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - \\
 &\quad \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} - \frac{1}{2} \sum_{k \neq n} |n^{(0)}\rangle \frac{\langle n^{(0)}|V|k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} + \dots
 \end{aligned} \tag{2.1.8}$$

### Effets de la dégénérescence

Dans le cas d'une dégénérescence des états d'énergie, les calculs précédents pour les modifications d'énergie du premier ordre ne sont pas affectés, mais le calcul de la modification de l'état propre est problématique car l'opérateur  $E_n^{(0)} - H_0$  n'a pas d'inverse bien défini. Cela relève d'un problème conceptuel plutôt que mathématique. Imaginons que l'on ait deux ou plusieurs états propres perturbés avec différentes énergies, continûment générés à partir d'un nombre égal d'états propres qui ont des énergies non perturbés dégénérés. Soit  $D$  le sous-espace occupé par ces états propres dégénérés. Le problème qui se pose, c'est qu'il n'y a pas de méthode unique pour choisir une base d'états propres de l'énergie pour un système non perturbé. En particulier, on peut construire une base différente pour  $D$  en choisissant différentes combinaisons linéaires des états propres le constituant. Dans une telle base, les états propres non perturbés ne généreraient pas continûment les états propres perturbés.

Ainsi, en présence d'une dégénérescence, la théorie de la perturbation ne fonctionne pas avec un choix de base arbitraire. On doit plutôt choisir une base telle que l'hamiltonien de perturbation soit diagonal dans le sous-espace dégénéré  $D$ .

En d'autres termes :

$$V|k^{(0)}\rangle = \epsilon_k |k^{(0)}\rangle + (\text{Termes hors de } D) \quad \forall |k^{(0)}\rangle \in D$$

Dans ce cas, l'équation pour la perturbation de premier ordre dans l'état propre d'énergie se réduit à :

$$(E_n^{(0)} - H_0)|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \text{ hors } D} (\langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle)|k^{(0)}\rangle$$

L'opérateur de gauche n'est pas singulier lorsqu'il est appliqué aux états propres n'appartenant pas à  $D$ , on peut alors écrire :

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \text{ hors } D} \frac{\langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle \quad (2.1.9)$$

## 2. La méthode de Nikiforov Uvarov (NU)

### Introduction

Dans cette section, nous présentons la méthode de Nikiforov Uvarov (NU) [22] qui est appliquée pour résoudre l'équation de Schrödinger par le biais des polynômes orthogonaux. Cette technique algébrique est basée sur la résolution d'une équation différentielle linéaire de second ordre qui a été utilisée notamment avec succès pour résoudre les équations d'onde de Schrödinger, Dirac [43], Klein-Gordon [44] et Duffin-Kemmer-Petiau [45]. On se limite à l'application de la méthode NU pour la résolution de l'équation de Schrödinger [22].

### 2.1. Formalisme de la méthode NU

Ce formalisme permet de réduire, en général, une équation différentielle du second ordre en une équation de type hypergéométrique avec une fonction de transformation appropriée  $s = s(r)$  :

$$F''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}F'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}F(s) = 0 \quad (2.2.1)$$

où  $\sigma$  et  $\tilde{\sigma}$  sont des polynômes au maximum du second degré, et  $\tilde{\tau}$  un polynôme du premier degré. Pour trouver une solution particulière à cette équation, on procède à la transformation suivante en posant :  $F(s) = \phi(s)y(s)$ . Ce qui conduit à une équation de type hypergéométrique :

$$\sigma(s)y''(s) + \tau(s)y'(s) + \Lambda y(s) = 0 \quad (2.2.2)$$

où  $y(s)$  satisfait à la relation de Rodrigues :

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s)\rho(s)] \quad (2.2.3)$$

$B_n$  étant une constante de normalisation et  $\rho(s)$  la fonction poids de  $y_n(s)$  qui satisfait à la condition  $(\sigma\rho)' = \tau\rho$ . En outre,

$$\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)}, \quad \tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s), \quad \Lambda_n = -n\tau'(s) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2.4)$$

où :

$$\pi(s) = \frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(s) + k\sigma(s)}, \quad k = \Lambda - \pi'(s) \quad (2.2.5)$$

Ici,  $\pi(s)$  est dépendante de la transformation de la fonction  $s(r)$ . La détermination de  $k$  est essentielle dans le calcul de  $\pi$ , pour lequel (la fonction  $k$ ), le déterminant de la racine carrée de (2.2.5) est égal à zéro.

A ce niveau, la condition imposée est que la dérivée de  $\tau$  soit négative pour reproduire des valeurs  $\Lambda_n$  positives, acceptables physiquement. Ceci nous oblige à restreindre nos choix à quelques fonctions spéciales pour résoudre l'équation de Schrödinger, ce qui implique que le formalisme de NU ne fonctionne pas correctement pour tous les potentiels. Mais cette lacune disparaît avec la méthode présentée ci après, car la nouvelle approche de Nikiforov et Uvarov qui est plus simple, flexible et élégante comparativement à la théorie originale et ce, en utilisant un traitement différent dans le calcul des énergies.

La nouvelle approche de NU consiste à transformer l'équation de Schrödinger pour qu'elle soit similaire à l'équation (2.2.1).

Considérons l'équation de Schrödinger ( $\hbar = 2m = 1$ ) :

$$\frac{\Psi''(r)}{\Psi(r)} = V(r) - E \quad (2.2.6)$$

La solution est de la forme :  $\Psi(r) = f(r)F[s(r)]$ . A partir de (2.2.6), on a :

$$\left(\frac{f''}{f} + \frac{F'' s'^2}{F} + \frac{s'' F'}{F} + 2\frac{F' s' f'}{F f}\right) = V - E$$

qui se réduit à l'équation donnée en (2.2.1) :

$$F'' + \left(\frac{s''}{s'^2} + 2\frac{f'}{s' f}\right)F' + \left(\frac{f''}{s'^2 f} + \frac{E - V}{s'^2}\right)F = 0 \quad (2.2.7)$$

donc, on a :

$$\frac{s''}{s'^2} + 2\frac{f'}{s' f} = \frac{\tilde{\tau}}{\sigma}, \quad \frac{f''}{s'^2 f} + \frac{E - V}{s'^2} = \frac{\tilde{\sigma}}{\sigma^2} \quad (2.2.8)$$

Ensuite, on décompose les termes d'énergie et du potentiel exprimés en (2.2.8) en deux parties qui correspondent aux contributions individuelles de F et f à la solution totale de sorte que :  $E - V = (E_F + E_f) - (V_F + V_f)$ . De là, la seconde égalité de (2.2.8) se transforme en deux équations :

$$\frac{f''}{f} = V_f + E_f \quad \text{et} \quad -\frac{\tilde{\sigma}}{\sigma^2} s'^2 = V_F + E_F \quad (2.2.9)$$

où f peut être exprimée d'une manière explicite comme suit :

$$f(r) \approx (s')^{-1/2} \exp\left[\frac{1}{2} \int^{s(r)} (\tilde{\tau}/\sigma) ds\right] \quad (2.2.10)$$

Donc pour un polynôme F donné, la fonction de transformation  $s(r)$  exprimée dans (2.2.9) et ainsi la fonction  $f$  de la formule (2.2.10) sont facilement calculables, du fait que,  $\sigma$ ,  $\tilde{\sigma}$  et  $\tilde{\tau}$  sont connues. De ce fait, par le biais de calculs assez simples, la partie droite des deux équations données par (2.2.9) révèle explicitement que la forme de notre potentiel ( $V_f + V_F$ ) et son spectre d'énergie total ( $E_f + E_F$ ) est relié à F. On aura finalement une fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger ( $\Psi(r) = f(r)F[s(r)]$ ). Cette dernière version de la méthode NU n'inclue aucune restriction dans les calculs comme celle de  $\tau' < 0$  utilisé dans la méthode initiale, en plus, elle n'utilise pas de calculs lourds, ce qui la rend plus simple et plus pratique.

## 2.2. Application

Pour illustrer la méthode NU, nous considérons les polynômes de Jacobi, qui ont une relation étroite avec les fonctions hypergéométriques [23]. Chaque fonction d'onde qui s'écrit en termes de polynômes de Jacobi peut aussi être exprimée en termes de fonctions hypergéométriques. Néanmoins, dans quelques cas, il est plus convenable d'utiliser les polynômes de Jacobi car une large classe de problèmes qui ont une solution exacte peuvent être résolus plus facilement si on prend ces polynômes comme point de départ.

Considérer les polynômes de Jacobi peut rendre plus facile le processus de calcul. On va commencer par réduire (2.2.1) en (2.2.2). Sachant que  $\tilde{\sigma} = \Lambda\sigma$ , où  $\Lambda$  est une constante reliée au spectre d'énergie et  $\pi \rightarrow 0$ ,  $\tilde{\tau} \rightarrow \tau$  et  $F \rightarrow y$  pour ce choix, ce sont les valeurs de  $\Lambda_n$  citées dans l'équation (2.2.4) qui procurent un test de fiabilité.

A partir de l'équation (2.2.2), on a [22] :

$$\sigma = 1 - s^2 \quad , \quad \tau = (\beta - \alpha) - (\alpha + \beta + 2)s \quad , \quad \Lambda_n = n(n + \alpha + \beta + 1) \quad (2.2.11)$$

qui remplissent les conditions de la première formulation de la méthode NU du fait que :

$$\Lambda_n = -n\tau'(s) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s)$$

qui implique que :  $\tau' < 0$ .

A partir de l'équation (2.2.8), on a  $V_F - E_F = -\frac{\Lambda_n}{\sigma}s'^2$  car  $\tilde{\sigma} = \Lambda\sigma$  pour le choix des polynômes de Jacobi. Comme on a une constante ( $E_F$ ) dans la partie gauche de l'équation, il doit y avoir au moins un terme non nul dans la partie droite, ce qui conduit à introduire une constante. Dans la plupart des cas, ça doit être un des termes contenant les paramètres  $n$ ,  $\alpha$  et  $\beta$  des polynômes de Jacobi. En posant :

$$\frac{s'^2}{1-s^2} = C,$$

où  $C = a^2$  est une constante positive, on peut avoir différents types de fonctions  $s(r)$  de cette simple équation différentielle, dépendante du signe de  $C$  (les travaux de Levai [24]). Choisisant une des cinq solutions de l'équation de  $C$ ,  $s(r) = \cos(ar)$ , on arrive à

$$E_F = a^2n(n + \alpha + \beta + 1) \quad , \quad V_F = 0 \quad (2.2.12)$$

A partir de (2.2.10), dans laquelle  $\tilde{\tau} \rightarrow \tau$ , on a :

$$f = (-a)^{-1/2}(1-s)^{(2\alpha+1)/4}(1+s)^{(2\beta+1)/4} \quad (2.2.13)$$

on aboutit à :

$$\begin{aligned} \frac{f''}{f} &= V_f - E_f \quad , \quad E_f = \frac{a^2}{4}(\alpha + \beta + 1)^2, \\ V_f &= \frac{a^2}{4}[(\alpha - \beta)^2 + (\alpha + \beta)^2 - 1]\operatorname{cosec}^2(ar) + \frac{a^2}{2}(\alpha^2 - \beta^2)\operatorname{cosec}(ar)\cot(ar) \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

D'où, le spectre d'énergie totale correspondant à la fonction d'onde pour le potentiel total  $V = V_F + V_f$  peut être facilement exprimé par  $E = E_F + E_f$  et  $\Psi = fF$  où  $F = P_n^{(\alpha, \beta)}$  qui est le polynôme de Jacobi généralisé. Les résultats obtenus sont en accord avec ceux présentés dans les travaux de Levai [24].

Considérons l'exemple spécifique où la méthode de NU habituelle ne permet pas de résoudre l'équation de Schrödinger (à cause du signe de la fonction  $\tau'$ ).

Pour cela, on prend un autre type de polynôme de Jacobi :  $(1-s)^\alpha(1+s)P_n^{(\alpha, \beta)}$  pour lequel :

$$\sigma = 1 - s^2 \quad , \quad \tau = (\alpha - \beta) - (\alpha + \beta - 2)s \quad , \quad \Lambda_n = (n+1)(n + \alpha + \beta) \quad , \quad s = \cos(ar) \quad (2.2.15)$$

Dans ce cas, on obtient

$$E_F = a^2(n+1)(n + \alpha + \beta) \quad , \quad E_f = \frac{a^2}{4}(\alpha + \beta - 1)^2,$$

$$V_f = \frac{a^2}{4}[(\alpha - \beta)^2 + (\alpha + \beta)^2 - 1]\operatorname{cosec}^2(ar) + \frac{a^2}{2}(\alpha^2 - \beta^2)\operatorname{cosec}(ar)\cot(ar) \quad , \quad V_F = 0 \quad (2.2.16)$$

où  $\operatorname{cosec}(ar)$  et  $\cot(ar)$  sont respectivement les fonctions inverses de  $\sin(ar)$  et  $\tan(ar)$ .

Bien que les expressions des énergies dans chacun des exemples semblent différentes, elles sont en fait identiques. Ce n'est pas surprenant puisque les potentiels  $V$  et les fonctions d'ondes sont les mêmes. Néanmoins, l'apparition de  $E_F$  dans (2.2.12) est plus simple que dans (2.2.16) du fait des propriétés des polynômes orthogonaux et des fonctions hypergéométriques dans le cas où  $n \rightarrow 0$ . C'est cette partie que la méthode NU classique n'a pu résoudre, car

$$\Lambda_n = -n\tau'(s) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s)$$

n'est pas valide dans le cas où  $\tau'(s)$  est positive.

Des considérations similaires sont appliquées sur les autres fonctions spéciales qui satisfont à l'équation différentielle linéaire homogène du second ordre.

## 3. La méthode de la SuperSymétrie en mécanique quantique (SUSYQM)

### Introduction

Les physiciens ont longtemps cherché à trouver une description unifiée de toutes les interactions de la nature, c'est à dire les interactions forte, électrofaible et gravitationnelle. Plusieurs tentatives ambitieuses ont été faites ces deux dernières décennies, et il s'avère que la SUSYQM est un ingrédient nécessaire dans toute approche d'unification. La SUSYQM relie les degrés de liberté des bosons et des fermions et permet de maîtriser les divergences de l'ultraviolet. L'algèbre incluse dans la SUSYQM est une algèbre de Lie améliorée qui utilise les relations de commutation et d'anti commutation. Elle fut introduite pour la première fois dans la théorie des cordes pour unifier les domaines fermioniques et bosoniques.

Pour les particules, la SUSYQM offre la possibilité d'unifier l'espace-temps et les symétries internes de la matrice S. La théorie de la gravitation fut généralisée à la théorie de la supergravité [25, 26] en incorporant la SUSYQM.

L'une des plus importantes prédictions de cette théorie qui la rend inévitable est l'existence par la SUSYQM des partenaires des quarks, des leptons et des bosons de jauge qui ont la même masse que leurs équivalents dans la SUSY. De nombreux schémas ont été élaborés incluant l'idée de la SUSYQM non perturbée. Dans ce contexte, la SUSY fut en premier étudiée dans le cas de la mécanique quantique (SUSYQM). Les recherches faites sur différents aspects de la SUSYQM, donnent des résultats forts intéressants, pas seulement comme modèle pour tester les méthodes de la théorie des champs, mais aussi la SUSYQM a permis d'élaborer la méthode de factorisation de Infield et Hull [27] qui fut la première méthode à catégoriser les problèmes des potentiels solvables analytiquement.

Dans ce qui suit, nous allons voir la formulation hamiltonienne de la SUSYQM qui donne un aperçu de l'application de ces méthodes à la résolution de l'équation de Schrödinger.

## La formulation Hamiltonienne de la supersymétrie en mécanique quantique (SUSYQM)

Considérons un hamiltonien à une dimension ; un des ingrédients clé dans la résolution exacte pour le spectre à une dimension est la relation qui existe entre les fonctions d'ondes et le potentiel. Choisissons pour commencer une énergie de l'état fondamental nulle, donc la fonction d'onde correspondante obéit à l'équation de Schrödinger suivante :

$$H_1\psi_0(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_0(x)}{dx^2} + V_1(x)\psi_0(x) = 0 \quad (2.3.1)$$

Donc

$$V_1(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)}$$

Ceci nous permet de faire une reconstruction totale du potentiel  $V_1(x)$  du fait de la connaissance de la fonction d'onde de l'état fondamental qui n'a pas de noeud. Une fois réalisée, il devient facile de factoriser l'hamiltonien en le définissant comme :

$$H_1 = A^\dagger A$$

où

$$A = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x) \quad , \quad A^\dagger = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x) \quad (2.3.2)$$

Ceci nous permet d'identifier que :

$$V_1(x) = W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \quad (2.3.3)$$

Cette équation est connue sous le nom de l'équation de Riccati. La quantité  $W(x)$  est généralement appelée "super potentiel" dans la littérature de la SUSYQM en mécanique quantique.

$W(x)$  s'écrit en terme de fonction d'onde de l'état initial :

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} \quad (2.3.4)$$

Cette solution est obtenue une fois la condition  $A\psi_0 = 0$  satisfaite, et ainsi on aura automatiquement  $H_1\psi_0 = A^\dagger A\psi_0$ .

La prochaine étape de la construction de la théorie de la supersymétrie reliée à l'hamiltonien original  $H_1$  consiste à définir l'opérateur  $H_2 = AA^\dagger$ . Une petite simplification montre que l'opérateur  $H_2$  est en fait un hamiltonien correspondant à un nouveau potentiel  $V_2(x)$ .

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) \quad , \quad V_2(x) = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \quad (2.3.5)$$

Les potentiels  $V_1(x)$  et  $V_2(x)$  sont connus comme étant des potentiels partenaires en supersymétrie.

Comme nous le verrons, le spectre d'énergie, les fonctions d'onde et la matrice  $S$  de  $H_1$  et  $H_2$  sont reliés. A cet effet, notons que  $E_n^{(1,2)} \geq 0$ . Pour  $n > 0$ , l'équation de Schrödinger pour  $H_1$  s'écrit :

$$H_1 \psi_n^1 = A^\dagger A \psi_n^1 = E_n^1 \psi_n^1$$

Ce qui implique :

$$H_2 (A \psi_n^1) = AA^\dagger A \psi_n^1 = E_n^1 (A \psi_n^1)$$

De la même manière, l'équation de Schrödinger pour  $H_2$  s'écrit :

$$H_2 \psi_n^2 = AA^\dagger \psi_n^2 = E_n^2 \psi_n^2$$

Ce qui implique :

$$H_1 (A^\dagger \psi_n^2) = A^\dagger AA^\dagger \psi_n^2 = E_n^2 (A^\dagger \psi_n^2)$$

A partir de ces expressions et du fait que  $E_0^1 = 0$ , il est clair que les énergies et les fonctions d'onde des deux hamiltoniens  $H_1$  et  $H_2$  sont reliées par :

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= E_{n+1}^{(1)}, & E_0^{(1)} &= 0, \\ \psi_n^2 &= [E_{n+1}^{(1)}]^{-1/2} A \psi_{n+1}^{(1)}, & n &= 0, 1, 2, \dots \\ \psi_{n+1}^{(1)} &= [E_n^{(2)}]^{-1/2} A^\dagger \psi_n^{(2)}. \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

Notons que si les fonctions  $\psi_{n+1}^{(1)}$  ( $\psi_n^{(2)}$ ) de  $H_1$  ( $H_2$ ) sont normalisées, alors les fonctions d'onde  $\psi_n^2$  ( $\psi_{n+1}^{(1)}$ ) dans les équations ci dessus sont aussi normalisées.

De plus, l'opérateur  $A(A^\dagger)$  ne convertit pas seulement les fonctions de  $H_1(H_2)$  en fonctions de  $H_2(H_1)$  avec la même énergie, mais il détruit (crée) un noeud dans les fonctions. Dès que l'état fondamental de la fonction de  $H_1$  est annihilé par l'opérateur  $A$ , cet état n'aura pas de partenaire de supersymétrie.

Par conséquent la connaissance de toutes les fonctions d'onde de  $H_1$  nous permet de déterminer celles de  $H_2$  en utilisant  $A$ , et vice versa en utilisant  $A^\dagger$ . On peut ainsi reconstruire toute les fonctions d'onde de  $H_1$  à partir de celles de  $H_2$  excepté l'état fondamental.

La raison principale de la dégénérescence du spectre de  $H_1$  et  $H_2$  peut être comprise plus facilement des propriétés de l'algèbre de la supersymétrie. Donc on peut considérer la matrice hamiltonienne de la SUSYQM de la forme suivante :

$$H = \begin{bmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix} \quad (2.3.6)$$

qui contient  $H_1$  et  $H_2$ . Cette matrice hamiltonienne est une partie de l'algèbre utilisée ici qui contient les opérateurs bosoniques et fermioniques avec les relations de commutation et d'anti-commutation. On considère les opérateurs :

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{bmatrix} \quad (2.3.7)$$

$$Q^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.3.8)$$

en même temps que  $H$ . Les relations de commutation et d'anti commutation alors décrivent la super algèbre  $U(1)$  :

$$\begin{aligned} [H, Q] &= [H, Q^\dagger] = 0, \\ \{Q, Q^\dagger\} &= H, \quad \{Q, Q\} = \{Q^\dagger, Q^\dagger\} = 0. \end{aligned} \quad (2.3.9)$$

Le fait que les super charges  $Q$  et  $Q^\dagger$  commutent avec  $H$  est responsable de la dégénérescence. Les opérateurs  $Q$  et  $Q^\dagger$  peuvent être interprétés comme des opérateurs qui changent les degrés de liberté bosoniques en degrés de liberté fermioniques et vice versa.

## Chapitre 3 :

La résolution du problème  
pour différents potentiels

## 1.Le formalisme

Dans ce chapitre, nous présentons notre approche pour résoudre l'équation de Schrödinger radiale indépendante du temps avec le formalisme du développement en séries de puissances et ce, avec les potentiels suivant : de Hulthen, le ECSC, le PSEC et le potentiel de Woods Saxon. Mais, rappelons d'abord quelques aspects mathématiques de cette méthode notamment le développement en séries de puissances et l'aspect physique pour le type de potentiels qui sera considéré.

### 1.1.Rappel des aspects mathématiques

Si nous avons une séquence infinie de termes  $u_1, u_2, u_3, \dots$ , on définit la  $i^{eme}$  somme partielle comme :

$$s_i = \sum_{n=1}^i u_n \quad (3.1.1)$$

Si la somme partielle  $s_i$  converge vers une limite (finie) quand  $i \rightarrow \infty$  :

$$\lim_{i \rightarrow \infty} s_i = S$$

la série infinie  $\sum_{n=1}^{\infty} u_n$  est dite convergente et a comme valeur S. Notons que raisonnablement, mais arbitrairement, nous avons défini la somme de série infinie comme étant égale à S.

Nous devons considérer que la condition nécessaire pour que cette série converge à une limite est que  $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = 0$ . Cette condition, néanmoins, n'est pas suffisante pour garantir la convergence.

En étendant ce concept au fait que chaque terme  $u_n$  peut être une fonction variable,  $u_n = u_n(x)$ , la somme partielle devient une fonction de la variable x :

$$s_n(x) = u_1(x) + u_2(x) + \dots + u_n(x) \quad (3.1.2)$$

Donc on a :

$$\sum_{n=1}^{\infty} u_n(x) = S(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} s_n(x) \quad (3.1.3)$$

Rappelons le concept de la convergence uniforme. Si pour tout  $\epsilon > 0$  très petit, il existe un nombre  $N$ , indépendant de  $x$  dans l'intervalle  $[a, b]$  ( $a \leq x \leq b$ ) de sorte que :

$$|S(x) - s_n(x)| < \epsilon \quad n \geq N \quad (3.1.4)$$

alors les séries sont dites *uniformément convergentes* sur l'intervalle  $[a, b]$ . Cela dit, pour qu'une série de fonctions soit uniformément convergente, il faut qu'il soit possible de trouver un nombre fini  $N$  de sorte que la somme de la série infinie  $|\sum_{i=N+1}^{\infty} u_i(x)|$ , soit inférieure à un nombre arbitraire  $\epsilon$  aussi petit soit il, pour tout  $x$  dans un intervalle donné.

Un des tests les plus utilisés pour démontrer la convergence uniforme est le *test de Weirstrass* qui est formulé comme suit :

Si on peut construire une série de nombres  $\sum_{i=1}^{\infty} M_i$ , pour laquelle  $M_i \geq |u_n(x)|$  pour tout  $x$  dans l'intervalle  $[a, b]$  et  $\sum_i^{\infty} M_i$  est convergente, la série  $\sum_i^{\infty} u_i(x)$  sera uniformément convergente dans l'intervalle  $[a, b]$ .

La preuve de ce test est directe et simple. Comme  $\sum_i^{\infty} M_i$  converge, alors il existe des nombres  $N$  de sorte que pour  $n + 1 \geq N$  on a :

$$\sum_{i=n+1}^{\infty} M_i < \epsilon \quad (3.1.5)$$

Cela découle de la définition de la convergence. Alors avec  $|u_i(x)| \leq M_i$  pour tout  $x$  dans l'intervalle  $[a, b]$  :

$$\sum_{i=n+1}^{\infty} |u_i(x)| < \epsilon \quad (3.1.6)$$

D'où :

$$|S(x) - s_n(x)| = \sum_{i=n+1}^{\infty} |u_i(x)| < \epsilon \quad (3.1.7)$$

et par définition  $\sum_{i=1}^{\infty} u_i(x)$  est uniformément convergente dans  $[a, b]$ . Comme nous avons spécifié la valeur absolue dans la formulation du test de Weirstrass, la série  $\sum_{i=1}^{\infty} u_i(x)$  est ainsi absolument convergente.

## 1.2. Aspects physiques

Les potentiels qu'on va étudier sont des potentiels de type exponentiel et d'écrantage (Hulthen, ECSC, PSEC et Woods Saxon) qui sont utilisés dans différents domaines de la physique, ils dépendent d'une seule composante. Au cours de ces deux dernières décennies, ces potentiels ont fait l'objet de nombreux calculs avec différentes méthodes [1–15, 17–22, 28–30, 34–36, 40–42].

Partant de l'équation de Schrödinger à trois dimensions en coordonnées cartésiennes, on a :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x, y, z) - E\right) \psi(x, y, z) = 0 \quad (3.1.8)$$

Cette équation, en coordonnées sphériques avec les changements de variables suivants :

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (3.1.9)$$

du fait que :

$$\begin{cases} r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} \\ \theta = \arccos \frac{z}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} \\ \varphi = \arctan \frac{y}{x} \end{cases} \quad (3.1.10)$$

s'écrit :

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \right) + V(r) \right] \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \\ & = E \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

En posant :  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$  où  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  et  $R_{nl}(r)$  sont définies à partir des équations suivantes :

$$\left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] Y_{lm}(\theta, \varphi) = -l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.1.12)$$

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R_{nl}(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R_{nl}(r) = 0$$

Habituellement, la fonction  $R_{nl}(r)$  est définie comme suit :

$$R_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r}$$

Sachant que :

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \frac{u_{nl}(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} u_{nl}(r)$$

On aboutit à l'équation de Schrödinger indépendante du temps qu'on va résoudre avec les potentiels cités au début de cette section.

$$\frac{d^2 u_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] u_{nl}(r) = 0 \quad (3.1.13)$$

Il est important de rappeler que dans nos calculs, nous utilisons la condition suivante :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_{nl}(r) = 0 \quad (3.1.14)$$

qui n'est autre que la condition physique imposée à la fonction d'onde pour garantir une densité de probabilité finie.

## 2. Le potentiel d'Hulthén

Le potentiel d'Hulthén [1] est l'un des plus importants potentiels à courte portée utilisé dans les problèmes de physique nucléaire, physique atomique, matière condensée, etc... [2]. Il est utilisé pour décrire les états limites et continus du système d'interaction. Il est intéressant de résoudre l'équation non relativiste de Schrödinger avec ce potentiel.

Des méthodes analytiques comme la SUSYQM (Super symétrie en mécanique quantique) [13] et la méthode de Nikiforov - Uvarov (NU) [28] ont été appliquées pour la résolution de l'équation d'onde pour un moment angulaire quantique  $l \neq 0$ . L'équation de Schrödinger radiale pour le potentiel d'Hulthén a été résolue par différentes méthodes [1, 29, 30] pour  $l = 0$ . Pour le cas où  $l \neq 0$ , l'équation (3.1.13) n'admet pas de solutions analytiques avec le potentiel d'Hulthén. De nombreuses méthodes ont été développées pour déterminer les valeurs propres : méthodes variationnelle [2], les perturbations [3], le développement en  $1/N$  [17], la méthode NU [18] et SUSYQM [19].

Dans notre cas, nous proposons une méthode alternative, le formalisme du développement en séries de puissances pour obtenir les énergies ainsi que les fonctions d'onde correspondantes.

Le potentiel d'Hulthén s'écrit sous la forme suivante :

$$V_H(r) = -Ze^2\delta \frac{e^{-\delta r}}{1 - e^{-\delta r}} \quad (3.2.1)$$

où  $Z$  et  $\delta$  sont respectivement, le nombre atomique et le paramètre d'écrantage qui détermine la portée du potentiel d'Hulthén. Ce potentiel agit comme le potentiel Coulombien quand  $r \rightarrow 0$ , mais dans les régions asymptotiques, le potentiel d'Hulthén décroît en exponentielle, donc son influence est moins importante que celle du potentiel Coulombien. Néanmoins, pour les petites valeurs du paramètre d'écrantage  $\delta$ , le potentiel d'Hulthén a une plus grande portée et devient ainsi similaire au potentiel de Coulomb.

En posant :

$$\epsilon^2 = \frac{-2E}{\delta^2} \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{1}{\delta} \quad (3.2.2)$$

avec  $m = e = \hbar = 1$  et  $Z = 1$ , l'équation (3.1.13) s'écrit :

$$u''(r) + \left[ 2E + 2\delta \frac{e^{-\delta r}}{1 - e^{-\delta r}} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u(r) = 0$$

En faisant le changement de variable suivant :

$$\rho = \delta r$$

On obtient :

$$u''(\rho) + \left[ \frac{2E}{\delta^2} + \frac{2}{\delta} \frac{e^{-\rho}}{1 - e^{-\rho}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0$$

Tenant compte de (3.2.2), on a :

$$u''(\rho) + \left[ -\epsilon^2 + 2\gamma \frac{e^{-\rho}}{1 - e^{-\rho}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0 \quad (3.2.3)$$

L'expression du potentiel de Hulthén peut s'écrire :

$$\frac{e^{-\rho}}{1 - e^{-\rho}} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_m}{m!} \rho^{m-1} \quad (3.2.4)$$

où les  $B_m$  sont les nombres de Bernoulli.

L'équation (3.2.3) s'écrit :

$$u''(\rho) + \left[ -\epsilon^2 + 2\gamma \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_m}{m!} \rho^{m-1} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0 \quad (3.2.5)$$

La solution de l'équation (3.2.5) peut s'écrire sous la forme :

$$u(\rho) = \rho^s e^{-\epsilon\rho} \phi(\rho) \quad (3.2.6)$$

où le paramètre  $s$  sera fixé par la suite dans nos calculs.

Tenant compte de (3.2.4) et (3.2.6), l'équation (3.2.3) s'écrit :

$$\begin{aligned} & [s(s-1)\rho^{s-2}\phi + s\rho^{s-1}\phi' - \epsilon s\rho^{s-1}\phi - \epsilon\rho^s\phi' + s\rho^{s-1}\phi' + \rho^s\phi''] e^{-\epsilon\rho} \\ & - \epsilon [s\rho^{s-1}\phi - \epsilon\rho^s\phi + \rho^s\phi'] e^{-\epsilon\rho} - \epsilon^2\rho^s e^{-\epsilon\rho}\phi \\ & + 2\gamma e^{-\epsilon\rho}\phi \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_m}{m!} \rho^{m+s-1} - l(l+1)e^{-\epsilon\rho}\phi\rho^{s-2} = 0 \end{aligned}$$

où la variable  $\rho$  de la fonction  $\phi$  a été omise pour simplifier l'écriture.

En multipliant par  $e^{\epsilon\rho}\rho^{2-s}$ , on obtient :

$$\begin{aligned} & s(s-1)\phi + s\rho\phi' - \epsilon s\rho\phi - \epsilon\rho^2\phi' + s\rho\phi' + \rho^2\phi'' - \epsilon s\rho\phi + \epsilon^2\rho^2\phi - \epsilon\rho^2\phi' - \epsilon^2\rho^s\phi \\ & + 2\gamma\phi \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_m}{m!} \rho^{m+1} - l(l+1)\phi = 0 \end{aligned}$$

Finalement, on obtient :

$$[s(s-1) - l(l+1)]\phi + (2s\phi' - 2s\epsilon\phi)\rho + (\phi'' - 2\epsilon\phi')\rho^2 + 2\gamma\phi \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_m}{m!} \rho^{m+1} = 0 \quad (3.2.7)$$

La fonction  $\phi(\rho)$  peut s'écrire sous le développement en séries suivant :

$$\phi(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \rho^k \quad (3.2.8)$$

En posant  $s = l + 1$  (le cas où  $s = -l$  est exclu car il conduit à une divergence dans les résultats finaux), on obtient l'équation suivante :

$$\begin{aligned} & 2(l+1) \left[ \sum_{k=0}^{\infty} k \alpha_k \rho^k - \epsilon \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \rho^{k+1} \right] + \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) \alpha_k \rho^k - 2\epsilon \sum_{k=0}^{\infty} k \alpha_k \rho^{k+1} \\ & + 2\gamma \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_m}{m!} \alpha_k \rho^{k+m+1} = 0 \end{aligned}$$

Après quelques transformations simples, on obtient :

$$2(l+1) \left[ \sum_{k=0}^{\infty} k \alpha_k \rho^k - \epsilon \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \rho^{k+1} \right] + \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) \alpha_k \rho^k - 2\epsilon \sum_{k=0}^{\infty} k \alpha_k \rho^{k+1} \\ + 2\gamma \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^k \frac{B_m}{m!} \alpha_{k-m} \rho^{k+1} = 0$$

En posant  $k = n$  dans la première et la troisième somme (où le premier terme est nul), et  $k = n-1$  pour les autres sommes, on obtient :

$$2(l+1) \left[ \sum_{n=1}^{\infty} n \alpha_n \rho^n - \epsilon \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_{n-1} \rho^n \right] + \sum_{n=1}^{\infty} n(n-1) \alpha_n \rho^n - 2\epsilon \sum_{n=1}^{\infty} (n-1) \alpha_{n-1} \rho^n \\ + 2\gamma \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{n-1} \frac{B_m}{m!} \alpha_{n-m-1} \rho^n = 0$$

Qui devient :

$$2(l+1) [n \alpha_n - \epsilon \alpha_{n-1}] + n(n-1) \alpha_n - 2\epsilon (n-1) \alpha_{n-1} + 2\gamma \sum_{m=0}^{n-1} \frac{B_m}{m!} \alpha_{n-m-1} = 0$$

En groupant les termes communs en  $\alpha_i$  on a :

$$n(2l+n+1) \alpha_n - 2\epsilon(l+n) \alpha_{n-1} + 2\gamma \sum_{m=0}^{n-1} \frac{B_m}{m!} \alpha_{n-m-1} = 0$$

On obtient finalement la relation de récurrence suivante pour les coefficients  $\alpha_n$  :

$$\alpha_n = \frac{(n+l)\epsilon \alpha_{n-1} - \gamma \sum_{m=0}^{n-1} \frac{B_m}{m!} \alpha_{n-m-1}}{n \left( l + \frac{n+1}{2} \right)} \quad n \geq 1 \quad (3.2.9)$$

Il y a lieu de noter que dans notre approche, aucune contrainte ni paramètre ajustable n'ont été introduits dans notre calcul. Finalement, la solution analytique de l'équation de Schrödinger pour le potentiel d'Hulthén s'écrit sous la forme :

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\epsilon \rho} \left( \alpha_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \rho^n \right) \quad \alpha_0 \neq 0 \quad (3.2.10)$$

La solution  $u(\rho)$  est fonction du moment angulaire  $l$ , des niveaux d'énergie  $E$  (i.e.  $\epsilon$ ) et du paramètre d'écrantage  $\delta$ .

Pour obtenir les énergies, on utilise la propriété fondamentale des fonctions d'onde :

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} u(\rho) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} \rho^s e^{-\epsilon \rho} \sum_{n=1}^{\infty} (\alpha_0 + \alpha_n \rho^n) = 0$$

et ce pour un  $\alpha_0$  donné ( $\alpha_0 = 1$ ).

Et pour obtenir les niveaux d'énergie, nous avons élaboré un programme qui consiste à résoudre cette équation polynomiale pour un  $\rho$  ayant une valeur fixe assez grande. Ces deux derniers paramètres sont fixés dans le but d'atteindre une certaine stabilité dans nos résultats.

### 3. Le potentiel ECSC

Le potentiel exponentiel-cosinus écranté ECSC (Exponential Cosine Screened Coulomb) s'écrit sous la forme suivante :

$$V(r) = -a \frac{\exp(-\mu r) \cos(\lambda r)}{r} \quad (3.3.1)$$

où  $a$  est le coefficient de couplage,  $\mu$  et  $\lambda$  sont des paramètres d'écrantage.

Ce potentiel appartient à une large gamme de potentiels utilisés dans différents domaines de la physique. Les résultats obtenus avec ce potentiel ont été améliorés par le biais de différentes méthodes analytiques et numériques pour la détermination des états d'énergies et des fonctions d'onde associées [4–11]. Le cas particulier où  $\mu = \lambda$  de ce potentiel, a été traité dans le cadre de la théorie des perturbations avec  $\lambda$  considéré comme paramètre de perturbation [4–7]. Dans le même cas ( $\mu = \lambda$ ), le développement pour de grands  $N$  fut appliqué pour obtenir les états d'énergies [9, 10]. La méthode du déterminant en séries de Hill développée par Killigbeck [10] a été appliquée pour le calcul des énergies pour quelques valeurs particulières de  $\mu$  et  $\lambda$ . Une constante ajustable et un facteur de diffusion ont été introduits. Une valeur d'énergie d'essai est requise dans cette approche.

Le traitement du problème avec ce potentiel s'effectue par analogie avec celui du potentiel d'Hulthén de l'équation (3.1.13).

En posant :

$$\rho = \mu r, \quad \epsilon = \sqrt{-2E}/\mu, \quad \kappa = \lambda/\mu \text{ et } \beta = a/\mu$$

Nous obtenons :

$$u''(\rho) + \left[ -\epsilon^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 2\beta \frac{e^{-\rho} \cos(\kappa\rho)}{\rho} \right] u(\rho) = 0 \quad (3.3.2)$$

avec  $m = \hbar = 1$ .

Les termes du potentiel ECSC (3.3.1) s'écrivent :

$$\begin{cases} \exp(-\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \rho^m \\ \cos(\kappa\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\kappa^{2n}}{(2n)!} \rho^{2n} \end{cases}$$

Ce qui donne :

$$\left\{ \begin{array}{l} \exp(-\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} g_m \rho^m \quad \text{où} \quad g_m = \frac{(-1)^m}{m!} \\ \cos(\kappa\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} h_n \rho^{2n} \quad \text{où} \quad h_n = (-1)^n \frac{\kappa^{2n}}{(2n)!} \end{array} \right. \quad (3.3.3)$$

Le potentiel s'écrit finalement :

$$V(\rho) = -\frac{\beta}{\rho} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} g_m h_n \rho^{m+2n}$$

En posant :

$$\left\{ \begin{array}{l} n = q \\ m = p - 2q \Rightarrow p \geq 2q \end{array} \right.$$

On obtient :

$$V(\rho) = -\beta \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{[p/2]} g_{p-2q} h_q \rho^{p-1} \quad (3.3.4)$$

On constate que les traitements des potentiels d'Hulthén et ECSC sont similaires, les chemine-  
ments de résolution sont analogues.

En remplaçant la solution  $u(\rho)$  par sa forme explicitée dans la formule (3.2.6) et en reprenant la  
forme du potentiel on a :

$$[s(s-1) - l(l+1)]\phi + (2s\phi' - 2s\epsilon\phi)\rho + (\phi'' - 2\epsilon\phi')\rho^2 + 2\beta\phi \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{[p/2]} g_{p-2q} h_q \rho^{p+1} = 0 \quad (3.3.5)$$

En procédant de la même manière que pour le potentiel de Hulthén on obtient finalement :

$$2(l+1)[n\alpha_n - \epsilon\alpha_{n-1}] + n(n-1)\alpha_n - 2\epsilon(n-1)\alpha_{n-1} + 2\beta \sum_{p=0}^{n-1} \sum_{q=0}^{[p/2]} g_{p-2q} h_q \alpha_{n-p-1} = 0$$

Ce qui nous permet d'aboutir à la relation de récurrence suivante :

$$\alpha_n = \frac{(n+l)\epsilon\alpha_{n-1} - \beta \sum_{p=0}^{n-1} \sum_{q=0}^{[p/2]} g_{p-2q} h_q \alpha_{n-p-1}}{n\left(l + \frac{n+1}{2}\right)} \quad n \geq 1 \quad (3.3.6)$$

## 4. Le potentiel PSEC

Le potentiel exponentiel cosinus partiellement écrané PSEC (Partially Screening Exponential Cosine) est défini pour décrire deux régions différentes correspondant à deux charges électriques, qui sont localisées autour de l'origine et à la limite asymptotique, respectivement. Ce potentiel s'écrit sous la forme suivante :

$$V(r) = -2Z_0V(r, \mu, \lambda) - 2Z_{as}\left(\frac{1}{r} - V(r, \mu, \lambda)\right) \quad (3.4.1)$$

où  $V(r, \mu, \lambda)$  représente le potentiel ECSC.  $Z_0$  et  $Z_{as}$  sont respectivement les charges correspondant aux deux régions d'interaction de ce potentiel et ce, pour les petites et grandes distances de  $r$ .

En posant  $\eta = Z_{as}/\mu$  et  $b = (Z_{as} - Z_0)/Z_{as}$ , et en suivant le même raisonnement et le même cheminement que pour les potentiels de Hulthén et ECSC, on obtient :

$$V(\rho) = 2\eta\left(b\sum_{p=0}^{\infty}\sum_{q=0}^{[p/2]}g_{p-2q}h_q\rho^{p-1} - \frac{1}{\rho}\right) \quad (3.4.2)$$

Ce qui conduit à la relation de récurrence suivante :

$$\alpha_n = \frac{[(n+l)\epsilon - \eta]\alpha_{n-1} + b\eta\sum_{p=0}^{n-1}\sum_{q=0}^{[p/2]}g_{p-2q}h_q\alpha_{n-p-1}}{n\left(l + \frac{n+1}{2}\right)} \quad n \geq 1 \quad (3.4.3)$$

## 5. Le potentiel de Woods Saxon

Le potentiel de Woods Saxon décrit les interactions entre nucléons (protons et neutrons) à l'intérieur du noyau : il s'écrit sous la forme suivante :

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left[\frac{r-R}{a}\right]} \quad (3.5.1)$$

où  $V_0$  représente le potentiel de profondeur du puits,  $a$  est l'épaisseur de peau,  $R = r_0 A^{1/3}$  le rayon nucléaire où  $r_0 = 1.25\text{fm}$  et  $A$  le nombre atomique (les valeurs utilisées sont :  $V_0 \approx 50\text{MeV}$  et  $a \approx 0.6\text{fm}$ ).

Le potentiel de Woods Saxon fait partie de l'un des trois potentiels qui décrivent l'interaction atome nucléon dans le modèle optique [31] (Avec le potentiel Coulombien et le potentiel spin orbite). Il est largement utilisé dans l'étude du processus de la diffusion élastique du nucléon et des particules lourdes.

L'équation (3.1.13) avec le potentiel de Woods Saxon peut être résolue analytiquement pour l'onde  $s$  ( $l = 0$ ), l'interaction centrifuge étant nulle. Cependant pour le cas où  $l \neq 0$ , plusieurs approximations ont été développées pour résoudre l'équation de Schrödinger avec ce potentiel [13–15] [41, 42].

Dans notre approche, l'approximation de Pekeris [32–34] a été adoptée.

L'équation de Schrödinger avec le potentiel de Woods Saxon s'écrit :

$$U_{nl}''(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + \frac{V_0}{1 + \exp\left[\frac{r-R}{a}\right]} \right] U_{nl}(r) = 0 \quad (3.5.2)$$

L'approche développée pour les potentiels précédents ne s'applique pas directement au potentiel de Woods Saxon.

Nous allons utiliser l'approximation de Pekeris qui consiste à faire le développement de la barrière centrifuge en séries d'exponentielles dépendantes du rayon atomique [33].

Procédons au changement de variable suivant :

$$x = \frac{r - R}{R} \quad \alpha = \frac{R}{a}$$

Le développement de Taylor du potentiel centrifuge autour du point  $x = 0$  ( $r = R$ ) donne ( $\hbar = m = 1$ ) :

$$V_l(x) = \frac{l(l+1)}{2R^2} \frac{1}{(1+x)^2} = \delta(1 - 2x + 3x^2 - 4x^3 + \dots) \quad (3.5.3)$$

où  $\delta = \frac{l(l+1)}{2R^2}$ . Par le biais de l'approximation de Pekeris, nous allons remplacer ce potentiel centrifuge par la formule suivante :

$$V_l^*(x) = \delta \left( C_0 + \frac{C_1}{1 + \exp(\alpha x)} + \frac{C_2}{(1 + \exp(\alpha x))^2} \right) \quad (3.5.4)$$

Dans le but de définir les constantes  $C_0$ ,  $C_1$  et  $C_2$ , nous allons aussi développer ce potentiel en séries de Taylor autour de  $x = 0$  ( $r = R$ ) :

$$V_l^*(x) = \delta \left[ \left( C_0 + \frac{C_1}{2} + \frac{C_2}{4} \right) - \frac{\alpha}{4} (C_1 + C_2)x + \frac{\alpha^2}{16} C_2 x^2 + \frac{\alpha^3}{48} (C_1 + C_2)x^3 + \dots \right] \quad (3.5.5)$$

En égalisant les coefficients des puissances de  $x$  des équations (3.5.3) et (3.5.5), on obtient :

$$C_0 = 1 - \frac{4}{\alpha} + \frac{12}{\alpha^2}, C_1 = \frac{8}{\alpha} - \frac{48}{\alpha^2} \text{ et } C_2 = \frac{48}{\alpha^2}$$

En effectuant les changements de variables suivants :

$$\epsilon^2 = -2(E - \delta C_0)a^2; \beta = 2(V_0 - \delta C_1)a^2 \text{ et } \gamma = 2\delta C_2 a^2,$$

Et en posant  $\rho = \frac{r - R}{a}$ , on aboutit à l'équation de Schrödinger :

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left[ -\epsilon^2 + \frac{\beta}{1 + \exp(\rho)} - \frac{\gamma}{(1 + \exp(\rho))^2} \right] u(\rho) = 0 \quad (3.5.6)$$

Tenant compte des développements suivants :

$$\frac{1}{1 + \exp(\rho)} = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2^{n+1} - 1)B_{n+1}}{(n+1)!} \rho^n \quad (3.5.7)$$

$$\frac{1}{(1 + \exp(\rho))^2} = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2^{n+1} - 1)B_{n+1}}{(n+1)!} \rho^n - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1)(2^{n+2} - 1)B_{n+2}}{(n+2)!} \rho^n \quad (3.5.8)$$

où les  $B_n$  sont les nombres de Bernoulli,

et en posant  $u(\rho) = \rho^s e^{-\epsilon\rho} \phi(\rho)$

On obtient :

$$\begin{aligned} [s(s-1) - l(l+1)]\phi + (2s\phi' - 2\epsilon s\phi)\rho + (\phi'' - 2\epsilon\phi')\rho^2 - (\beta - \gamma)\phi \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2^{m+1} - 1)B_{m+1}}{(m+1)!} \rho^{m+2} \\ + \gamma\phi \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(m+1)(2^{m+2} - 1)B_{m+2}}{(m+2)!} \rho^{m+2} = 0 \end{aligned}$$

où  $\rho$  a été omis pour alléger l'écriture.

La fonction  $\phi(\rho)$  peut s'écrire :

$$\phi(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \rho^n$$

On obtient :

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} [s(s-1) - l(l+1)] \alpha_n \rho^n + \sum_{n=0}^{\infty} (2ns \alpha_n \rho^n - 2\epsilon s \alpha_n \rho^{n+1}) + \sum_{n=0}^{\infty} (n(n-1)\alpha_n \rho^n - 2n\epsilon \alpha_n \rho^{n+1}) \\ - (\beta - \gamma) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{(2^{m+1} - 1)B_{m+1}}{(m+1)!} \alpha_{n-m} \rho^{n+2} + \gamma \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{(m+1)(2^{m+2} - 1)B_{m+2}}{(m+2)!} \alpha_{n-m} \rho^{n+2} = 0 \end{aligned}$$

La procédure utilisée dans les sections précédentes permet d'aboutir à :

$$\begin{aligned} [s(s-1) - l(l+1)](\alpha_0 + \alpha_1\rho) + 2s\alpha_1\rho - 2\epsilon s\alpha_0\rho + \sum_{n=2}^{\infty} [s(s-1) - l(l+1)] \alpha_n \rho^n \\ + \sum_{n=2}^{\infty} 2ns \alpha_n \rho^n - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon s \alpha_n \rho^{n+1} + \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)\alpha_n \rho^n - 2 \sum_{n=1}^{\infty} n\epsilon \alpha_n \rho^{n+1} \\ - (\beta - \gamma) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{(2^{m+1} - 1)B_{m+1}}{(m+1)!} \alpha_{n-m} \rho^{n+2} + \gamma \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{(m+1)(2^{m+2} - 1)B_{m+2}}{(m+2)!} \alpha_{n-m} \rho^{n+2} = 0 \end{aligned}$$

En posant :

$$\begin{cases} s &= l + 1 \\ \alpha_1 &= \epsilon \alpha_0 \end{cases}$$

on obtient finalement :

$$2n(l+1)\alpha_n - 2\epsilon(l+1)\alpha_{n-1} + n(n-1)\alpha_n - 2(n-1)\epsilon\alpha_{n-1} - (\beta - \gamma) \sum_{m=0}^{n-2} \frac{(2^{m+1} - 1)B_{m+1}}{(m+1)!} \alpha_{n-m-2} + \gamma \sum_{m=0}^{n-2} \frac{(m+1)(2^{m+2} - 1)B_{m+2}}{(m+2)!} \alpha_{n-m-2} = 0$$

Ce qui donne la relation de récurrence suivante pour les  $\alpha_n$  dans le cas du potentiel de Woods Saxon :

$$\alpha_n = \frac{(n+l)\epsilon\alpha_{n-1} + (\beta - \gamma) \sum_{m=0}^{n-2} \frac{(2^{m+1} - 1)B_{m+1}}{(m+1)!} \alpha_{n-m-2}}{n\left(l + \frac{n+1}{2}\right)} - \frac{\gamma \sum_{m=0}^{n-2} \frac{(m+1)(2^{m+2} - 1)B_{m+2}}{(m+2)!} \alpha_{n-m-2}}{n\left(l + \frac{n+1}{2}\right)} \quad n \geq 2 \quad (3.5.7)$$

## Chapitre 4 :

### Analyse des résultats

## 1. Le potentiel d'Hulthén

Les résultats obtenus avec le potentiel d'Hulthén sont présentés dans les tableaux 1 et 2. Comme on peut le noter, nos résultats, obtenus par le biais du formalisme du développement en série (FDS), sont comparables à ceux obtenus avec les méthodes du développement en  $1/N$  [17] et de Nikiforov Uvarov [29,35], les divergences commencent à apparaître pour les grandes valeurs du paramètre d'écrantage  $\delta$ .

Dans notre algorithme ou programme, nous avons fixé  $\rho = 1000$ , avec le degré du polynôme de la fonction d'onde  $n$  égale à 12; ces deux paramètres nous ont permis d'atteindre un certain degré de stabilité (6 chiffres après la virgule) pour les premiers niveaux d'énergie.

$\delta$	Etats	FDS	$1/N$	NU	NU modifiée
0.002	1s	0.499001	0.499001	0.499001	0.499001
	2s	0.124002	0.124002	0.124002	0.124002
	3s	0.054560	0.054560	0.054560	0.054560
	4s	0.030258	0.030258	0.030258	0.030258
	5s	0.019013		0.001250	0.019125
0.010	1s	0.495013	0.495013	0.495013	0.495013
	2s	0.120050	0.120050	0.120050	0.120050
	3s	0.050668	0.050668	0.050668	0.050668
	4s	0.026450	0.026450	0.026450	0.026450
	5s	0.015073	0.015313	0.015313	0.015313
0.050	1s	0.475313	0.475313	0.475313	0.475313
	2s	0.101250	0.101250	0.101250	0.101250
	3s	0.032948	0.033375	0.033368	0.033368
	4s	0.025390	0.011304	0.011250	0.011250
0.200	1s	0.405000	0.404996	0.405000	0.405000
	2s	0.057023	0.045086	0.045000	0.045000

**Tableau 1.** Valeurs de l'énergie obtenues (-E) en fonction du paramètre d'écrantage  $\delta$  pour les états  $s$  ( $l = 0$ )

$$(m = \hbar = Z = 1).$$

Etats	$\delta$	FDS	SUSYQM	Intégration numérique	NU	Variationnelle
2p	0.025	0.112760	0.112760	0.112760	0.112761	0.112760
	0.050	0.101042	0.101042	0.101042	0.101044	0.101042
	0.075	0.089847	0.089847	0.089847	0.089849	0.089848
	0.100	0.079179	0.079179	0.079179	0.079177	0.079179
	0.150	0.041119	0.059441	0.059441	0.059398	0.059441
3p	0.025	0.043706	0.043706	0.043706	0.043707	0.043707
	0.050	0.033233	0.033163	0.033164	0.033162	0.033164
	0.075	0.028504	0.023933	0.023939	0.023921	0.023939
	0.100	0.030212	0.016032	0.016054	0.015982	0.016054
3d	0.025	0.043603	0.043603	0.043603	0.043604	0.043603
	0.050	0.032747	0.032753	0.032753	0.032751	0.032753
	0.075	0.023550	0.023030	0.023030	0.022995	0.023030
	0.100	0.023931	0.014483	0.014484	0.014336	0.014484
4p	0.025	0.019484	0.019948	0.019949	0.019949	0.019949
	0.050	0.021488	0.011043	0.011058	0.011044	0.011058
4d	0.025	0.019890	0.019846	0.019846	0.019846	0.019846
	0.050	0.018521	0.010661	0.010667	0.010633	0.010667
4f	0.025	0.019688	0.019691	0.019691	0.019691	0.019691

**Tableau 2.** Les valeurs de l'énergie du potentiel d'Hulthén ( $-E$ , en unités atomiques) en fonction du paramètre d'écrantage  $\delta$  dans le cas  $l \neq 0$ .

Comme on peut le voir, pour les petites valeurs du paramètres d'écrantage  $\delta$ , nous obtenons des résultats comparables à ceux obtenus par le biais des autres méthodes et ce, même pour les grandes valeurs de  $l$ . Cependant, pour des valeurs supérieures de  $\delta$ , les premières divergences commencent à apparaître.

L'avantage de la FDS est que contrairement aux autres méthodes, le FDS n'utilise aucune approximation, contrainte ou paramètre ajustable. La SUSYQM [19], la méthode variationnelle [2] (méthodes perturbative), le développement en  $1/N$  [17] (méthodes perturbative) et la méthode de Nikiforov Uvarov [18, 29, 35] (pour la NU standard, il y a restriction sur le choix du polynôme, et la NU modifiée est assez complexe) font tous appel à des approximations et des suppositions.

## 2. Le potentiel ECSC

Comme pour le potentiel d'Hulthén, la méthode du développement en séries de puissances donne de meilleurs résultats pour les premiers états, et notamment pour de petites valeurs du paramètre d'écrantage. La méthode FDS dans le cas du potentiel ECSC, ne fait intervenir aucune approximation ni paramètres ajustables au contraire de toutes les méthodes qu'on a utilisées pour la comparaison (les perturbations [37], le développement en  $1/N$  modifié [36], le développement en  $1/N$  [9], la méthode dynamique [34] (méthode variationnelle) ainsi que la méthode variationnelle [6] dans les tableaux 4 et 5).

Les valeurs des niveaux d'énergie ( $-E$ ) obtenues pour les potentiels ECSC et PSEC ont été déterminées par notre programme, mais le cheminement théorique qui a mené aux relations de récurrences a été élaboré dans le travail de M. Moulay et al. [40] pour  $l = 0$ , pour différentes valeurs des paramètres d'écrantage  $\mu$  et  $\lambda$ . Le degré du polynôme qui a conduit à la stabilité est de  $n = 10$ . Le cas  $\mu = \lambda$ , a été traité longuement par les autres méthodes. Les résultats dans ce cas, sont comparés à ceux obtenus dans les références [4–10] (correspondant à des méthodes perturbatives) dans le tableau 3.

$\mu \backslash \lambda$	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08
0.01	0.490001	0.489781	0.489413	0.488900	0.488240	0.487436	0.486487	0.485395
0.02	0.480224	0.480008	0.479648	0.479144	0.478497	0.477708	0.476778	0.475706
0.03	0.470591	0.470379	0.470026	0.469532	0.468898	0.468123	0.467210	0.466159
0.04	0.461100	0.460892	0.460546	0.460061	0.459438	0.458679	0.457783	0.456751
0.05	0.451748	0.451544	0.451204	0.450728	0.450117	0.449372	0.448492	0.447480
0.06	0.442533	0.442333	0.441999	0.441532	0.440932	0.440201	0.439337	0.438343
0.07	0.433453	0.433256	0.432928	0.432470	0.431881	0.431162	0.430315	0.429338
0.08	0.424504	0.424311	0.423989	0.423539	0.422961	0.422255	0.421423	0.420464

**Tableau 3.** Les énergies du potentiel d'ECSC ( $-E$ , en unités atomiques) en fonction des paramètres d'écrantage  $\mu$  et  $\lambda$  dans l'état  $1s$ .

Dans le tableau 4, nos résultats sont comparés avec ceux obtenus par les méthodes du développement en  $1/N$  [9], la méthode dynamique [34], la  $1/N$  décalée [36] et la méthode des perturbations [37]. La comparaison est faite dans le cas où  $\mu = \lambda$  et ce, pour l'état  $1s$  :

$\mu$	FDS	$1/N$	Dynamique	$1/N$ décalée	Méthode des Perturbations
0.01	0.490001	0.490001	0.490001		0.490001
0.02	0.480008	0.480008	0.480008	0.480008	0.480008
0.03	0.470026	0.470026	0.470026		0.470026
0.04	0.460061	0.460061	0.460061	0.460061	0.460061
0.05	0.450117	0.450117	0.450117		0.450117
0.06	0.440201	0.440200	0.440200	0.440201	0.440200
0.07	0.430315	0.430313			0.430313
0.08	0.420464	0.420461	0.420464	0.420664	0.420662
0.09	0.410653	0.410647			0.410649
0.1	0.400885	0.400875	0.400884	0.400884	0.400879

**Tableau 4.** Les énergies du potentiel ECSC ( $-E$ ) en fonction du paramètre d'écrantage  $\mu$  dans l'état  $1s$ .

Alors que pour le cas où  $l \neq 0$  (où la comparaison s'est faite aussi avec la méthode variationnelle [6]) :

$\mu$	état	FDS	Méthode variationnelle	Shifted $1/N$	Méthode des Perturbations
0.02	2s	0.105104	0.105104	0.105104	0.105103
	2p	0.105075		0.105075	0.105074
	3s	0.036306	0.036025	0.036027	0.036021
	3p	0.035919		0.035968	0.035964
	3d	0.035852		0.035851	0.035849
0.04	2s	0.085767	0.085769	0.085770	0.085762
	2p	0.085558		0.085559	0.085552
	3s	0.034681	0.018822	0.018867	0.018859
0.06	2s	0.066879	0.067421	0.067426	0.067390
	2p	0.066709		0.066777	0.066761
	3s	0.044524	0.005454	0.05666	0.007077
0.08	2s	0.056068	0.050384	0.050408	0.050358

**Tableau 5.** Les énergies du potentiel ECSC ( $-E$ ) en fonction du paramètre d'écrantage  $\mu$  dans les états  $2s$ ,  $2p$ ,  $3s$ ,  $3p$  et  $3d$ .

### 3. Le potentiel PSEC

Les niveaux d'énergies (-E) pour le potentiel PSEC dans le cas  $l = 0$  et pour différentes valeurs des paramètres d'écrantage  $\mu$  et  $\lambda$  sont présentés dans le tableau 6. Dans le cas particulier où  $\mu = \lambda = 0.025$ , les résultats ont été comparés à ceux obtenus dans le travail d'Ixaru [11] par le biais d'une méthode numérique. Ces résultats sont obtenus dans le cas  $Z_0 = 50$ ,  $Z_{as} = 1$ ,  $2m/\hbar^2 = 1$ ,  $a = -1$  et  $n = 12$ .

$\mu \backslash \lambda$	état	0.023	0.024	0.025	0.026
0.024	1s	2497.650	2497.650	2497.650	2497.650
	2s	622.648	622.648	622.648	622.647
	3s	275.426	275.426	275.425	275.425
0.025	1s	2497.550	2497.550	2497.550	2497.550
	2s	622.551	622.550	622.550	622.550
	3s	275.329	275.328	275.328	275.327
0.026	1s	2497.450	2497.450	2497.450	2497.450
	2s	622.453	622.453	622.452	622.452
	3s	275.232	275.231	275.230	275.230

**Tableau 6.** Les énergies du potentiel PSEC (-E) pour  $l = 0$ .

## 4. Le potentiel de Woods Saxon

état	FDS	NU	Numérique
1s	43.37	49.57	49.57
2s	37.47	48.50	48.50
2p	40.28	49.17	49.52
3s	31.51	46.96	46.96
3p	33.03	47.84	48.45
3d	40.23	48.68	49.40
4s	25.22	45.02	45.02

**Tableau 7.** Les énergies du potentiel de Wood Saxon (-E).

Les calculs des valeurs propres obtenues pour le potentiel de Woods Saxon avec la formule de récurrence (3.5.7), montre qu'il y a une convergence qui est observée. Cependant, ils diffèrent de ceux obtenues par les autres méthodes exposées dans le tableau 7 (Nikiforov Uvarov [41] et une méthode numérique [42]).

On remarque une convergence assez lente qui ne donne pas à des résultats comparables à ceux obtenus par les autres méthodes.

Si pour le cas où  $l = 0$ , aucune approximation n'a été faite, l'approximation de Pekeris introduite dans le cas où  $l \neq 0$ , ne convient pas pour l'approche que nous avons adoptée.

Le traitement de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Woods Saxon nécessite de notre point de vue, l'utilisation d'une autre approche que celle utilisant l'approximation de Pekeris.

## Conclusion générale

Eu égard aux nombreuses publications sur ce sujet, la résolution de l'équation de Schrödinger représente un intérêt certain pour la physique moderne.

Dans le premier chapitre, nous avons énoncé le cheminement qui a mené à l'apparition de la mécanique quantique et de l'équation de Schrödinger.

S'en est suivi, la formulation de quelques méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger (les perturbations, la méthode de Nikiforov Uvarov (NU) et la Supersymétrie en mécanique quantique (SUSYQM)).

Dans notre travail, nous avons utilisé le formalisme du développement en séries de puissance pour résoudre cette équation, où les valeurs de l'énergie (spectre énergétique) sont déduites de l'une des propriétés fondamentales des fonctions d'ondes solution de l'équation de Schrödinger (densité de probabilité finie).

La comparaison de nos résultats avec ceux obtenus avec d'autres méthodes relativement récentes, montre que notre approche peut constituer une alternative intéressante pour la résolution de ce type d'équation.

Ainsi, nous obtenons des formules basées sur des relations de récurrence pour exprimer la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger.

Les résultats obtenus par l'application de la méthode du développement en séries sur les potentiels d'Hulthén, ECSC (Exponential Cosine Screened Coulomb) et PSEC (Partially Screening Exponential Cosine) sont en accord avec les précédents résultats. Il faut noter qu'aucune approximation ni paramètre ajustable n'ont été introduits.

Les tableaux 1 et 2 montrent pour le potentiel de Hulthén une stabilité et une convergence remarquable, l'accord avec les résultats des autres méthodes est satisfaisant pour les petites valeurs du paramètre d'écrantage  $\delta$ . Les valeurs obtenues dans ce cas, sont en parfait accord avec l'intégration numérique et la méthode variationnelle [2] mais aussi la méthode de Nikiforov Uvarov [18] et la mécanique quantique supersymétrisée [19].

Aussi, les résultats obtenus pour les potentiels ECSC et PSEC et dont les résultats sont présentés dans les tableaux 3, 4, 5 et 6 (concernant PSEC) sont, pour les petites valeurs du paramètre d'écrantage  $\mu$ , en concordance avec ceux obtenues par le biais des autres méthodes : les perturbations [37], le développement en  $1/N$  modifié [35], le développement en  $1/N$  [9], la méthode dynamique [33] et la méthode variationnelle [6] en ce qui concerne le potentiel ECSC, ainsi que les méthodes numériques d'Ixaru [11] pour le potentiel PSEC).

Pour de grandes valeurs des paramètres d'écrantage ainsi que lorsque le nombre atomique  $l$  augmente, les résultats obtenus pour les potentiels d'Hulthén, ECSC et PSEC diffèrent de ceux obtenues par les autres méthode. Mais on remarque toujours une certaine convergence qui s'amplifie avec l'augmentation du nombre de termes  $n$  de la somme de la fonction  $\phi(\rho)$ .

L'un des aspects intéressent de cette méthode est qu'elle contourne les problème de singularité en ce qui concerne les potentiel d'Hulthén, ECSC et PSEC.

Elle constitue aussi une bonne alternative pour déterminer les bonnes valeurs des paramètres d'écrantages utilisables pour l'expérience (par un processus inverse).

La tentative de résoudre l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Woods Saxon montre que l'approche utilisant l'approximation de Pekeris ne convient pas.

Ces résultats valorisent véritablement cette méthode, et son application peut être étendue à d'autres potentiels tels que le potentiel de Morse ou le potentiel de type hyperbolique.

Finalement, la méthode du développement en séries de puissances est caractérisée par sa simplicité, et surtout par le fait qu'aucune contrainte ou paramètres ajustables n'ont été introduits dans les calculs. Elle permet véritablement de résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour obtenir le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'ondes correspondantes. En perspective, il serait intéressant de faire une analyse comparative des fonctions propres obtenues dans le présent travail avec celles des autres méthodes.

# Bibliographie

- [1] L. Hulthén, Ark. Mat. Astron. Fys. A, **28**, 5 (1942).
- [2] Y. P. Varshni, Phys. Rev. A **41**, 4682 (1990).
- [3] P. Matthys and H. De Meyer, Phys. Rev. A **38**, 1168 (1988).
- [4] P. P Ray and A. Ray, Phys. Lett. **78A** 443 (1980).
- [5] P. P Ray and A. Ray, Phys. Lett. **83A** 383 (1981).
- [6] C. S. Lai, Phys. Rev. A **26**, 2245 (1982).
- [7] V. Fack, H. De Meyer and G. Vanden Berghe, J. Phys. A : Math Gen. **19** L709 (1986).
- [8] Ashok Chatterjee, Phys. Rev. A **35**, 2722 (1987).
- [9] R. Server and C. Tezcan, Phys. Rev. A **35**, 2725 (1987).
- [10] J. Killingbeck, J. Phys. A : Math Gen. **21** 111 (1988).
- [11] L.Gr. Ixaru, H. De Meyer and G. Vanden Berghe, Phys. Rev. E **61** 3151 (2000).
- [12] R. D. Woods and D. S. Saxon, Phys. Rev. **95** 577 (1954).
- [13] Cooper F, Khare A and Sukhatme U 1995 Phys. Rep. **251** 267.
- [14] D. A. Morales, Chem. Phys. Lett. **394** 68 (2004).
- [15] V. H. Baladov, H. I. Ahmadov and A. I. Ahmadov, arXiv :0905.2731v1 [math-ph] 17 May 2009.
- [16] J. E. G Farina *Quantum Theory Of Scattering Processes* (1973 - Oxford, New York, Pergamon Press).
- [17] Tang A Z and Chan F T, Phys. Rev. A **35** 911 (1987).
- [18] S. M. Ikhdair, arXiv : 0901.0801v1 [quant-ph] 7 jan 2009.
- [19] Gonul B, Ozer O, Cancelk Y and Kockak M, Phys. Lett. A **275** 238 (2000).
- [20] Albert Messiah *Mécanique quantique Chapitre 16* (1964 - Paris, Dunod).
- [21] C. Cohen Tannoudji *Mécanique quantique chapitre 11* (1997 - Paris, Hermann).
- [22] B Gonul and K Koksakal *Phys. Scr.* **75**, 686-690 (2007).

- [23] Abramowitz M and Stegun I. A *Handbook of mathematical functions* (1970 - New York, Dover).
- [24] Levai G, J. Phys. A : Math. Gen. **22** 689(1989).
- [25] S. Ferrara, D. Freedman and P. van Nieuwenhuizen, Phys. Rev. D **13**, 3214 (1976).
- [26] S. Deser and B. Zumin, Phys. Lett. **B62** 335 (1976).
- [27] L. Infeld and T.E. Hull, Rev. Mod. Phys. **23** 21 (1951).
- [28] Nikiforov A. F and Uvarov V. B *Special Functions of Mathematical Physics* (1988 - Bale, Birkhauser).
- [29] Akdas M and Sever R, J. Mol. Struct. **710** 223(2004).
- [30] Flügge S *Practical Quantum Mechanics vol 1* (1994 - Berlin : Springer).
- [31] O. V. Bepalova, E. A. Romanovsky and T. I. Spasskaya, J. Phys. G **29**, 1193 (2003).
- [32] C.L. Pekeris, Phys. Rev. **45** 98 (1934).
- [33] O. Bayrak and I. Botzun, J. Phys. A **39** 6955 (2006) (arxiv : nucl-th / 0604042 V1). O. Bayrak, G. Kocak and I. Botzun, J. Phys. A : Math. Gen. **39** 11521 (2006) (arxiv : math-ph / 0609010 V1).
- [34] H. de Meyer et al, J. Phys. A **18**, L 849 (1985).
- [35] S. M. Ikhdair and R. Sever, arXiv : quant-ph/0508009v1 (01-Aug-2005).
- [36] S. M. Ikhdair and R. Sever, Z. Phys. D **28**, 1 (1993).
- [37] S. M Ikhdair and R. Sever, arXiv : quant-ph/0604073v1 (11-Apr-2006).
- [38] E. Schrödinger, Annalen der Physik, Vierte Folge, Band 80, p. 437 (1926).
- [39] J. W. S. Rayleigh, Theory of Sound, 2nd edition Vol. I, pp 115-118 (1894 - Macmillan, London).
- [40] M. Moulay, A. Mansouri, and S. Houamer Phys. Rev. E **67**, 017701 (2003).
- [41] A. Arda and R. Sever, arXiv : 0901.2773v1 [math-ph] (19-Jan-2009).
- [42] V. Ledoux, M. Van Daele and G. V. Berge, International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM 2005) Extended Abstracts, 1-4 Rhodes, Greece, 16-20 September 2005.
- [43] S. M. Ikhdair and R. Sever, arXiv : math-ph/1001.4327v2 (25-Mar-2010).
- [44] V. H. Badalov, H. I. Ahmadov, S. V. Badalov, arXiv : math-ph/0912.3890v2 (02-Jan-2011).
- [45] F. Yasuk et al, Phys. Scr. **71** 340 (2005).