

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOHAMED KHIDER-BISKRA

FACULTE DES SCIENCES EXACTES ET SCIENCES DE LA NATURE ET DE LA VIE

Département : Sciences de la Matière

Filière : Physique

N° d'ordre :

Série :

THESE

Présentée pour l'obtention du Diplôme de Doctorat en Physique

OPTION : Physique Théorique

THEME

Les états liés et de diffusions et l'introduction du Superpotentiel

par

Nadjoua Bensalah

Soutenue le :

devant le jury composé de :

Mr A. Attaf,	Professeur (Université de Biskra) :	Président
Mr A. Zerarka,	Professeur (Université de Biskra) :	Rapporteur
Mr A. Belgacem Bouzida,	Professeur (Université de Batna) :	Examineur
Mr M. Tayeb Meftah,	Professeur (Université de Ouargla) :	Examineur
Mr N. Attaf,	Professeur (Université de Constantine) :	Examineur
Mr N. Khelil,	Maître de Conf (Université de Biskra) :	Examineur

-2013-

Il y a que dans les mystérieuses équations de l'amour qu'on trouve logique et raison.

Pour mes parents pour leur soutien indéfectible,

Mon époux, et mes très chers enfants, Hibat elrahmane et Yahya, les battements de mon cœur.

Faire la physique c'est apprendre sans cesse quelque chose d'encore plus excitant et intrigant que la veille. Je tiens donc à remercier ma famille et les gens qui m'entourent pour m'avoir écoutée patiemment chaque jour lorsque je rentrais complètement obnubilée par la MQSUSY et la méthode inverse. Mais, apprendre et comprendre ne se font pas tout seul et je remercie plus que profondément tout les gens qui ont répondu à mes questions pertinentes et impertinentes. Merci à Kamel pour m'avoir appris à être forte.

Je remercie enfin mon promoteur, le professeur Abed elouahab Zerarka qui tout au long de l'encadrement qu'il a bien voulu me fournir, m'a fait bénéficier de son expérience et de sa perspicacité.

N Bensalah

Remerciements

Le présent travail a été réalisé dans le cadre d'une thèse de doctorat au sein du département des sciences de la matière, (filiale physique), à l'université de Mohamed Khider, (Biskra), et d'un programme de recherche, avec l'appui moral et directive qui a été assuré par le Professeur Abdeouahab Zerarka, directeur de l'unité de ces recherches. Qu'il soit vivement remercié pour son appui et ces précieux conseils, car il m'a initié et formé au métier de la recherche, et ma donné le goût de la théorie et la physique quantique, même si tout n'a pas toujours été facile. Je voudrais lui adresser mes plus profonds remerciements et toute mon admiration pour sa valeur tant humaine que professionnel.

Je voudrais remercier l'ensemble des chercheurs que j'ai pu y rencontrer et qui m'ont permis par leurs échanges, et leurs réactions à mes exposés, ainsi que les discussions que nous avons pu avoir, ils ont souvent éclairé sous un jour nouveau certains aspects de mes recherches et m'ont surtout fait découvrir d'autres sujets, d'autres intérêts et perspectives de recherche.

J'ai eu la chance d'être entourée professionnellement et amicalement par des personnes formidables au sein de la faculté des sciences exactes et sciences de la nature et vie. Merci à tous et plus particulièrement Majda Hamzaoui, Saida Marmi, Saida Guergueb, Ghania Benchaben et Samira Zermane.

Je remercie aussi youcef Boumedjane pour son amitié avant tout, et sa lecture continue de ma thèse.

Les années de ma thèse ne sauraient être dissociées des enseignements que j'ai assurés à l'université de Mohamed Khider, en tant que maître assistant. Je voudrais remercier les différents enseignants avec qui j'ai travaillé et également l'ensemble de mes étudiants. Assurer des travaux dirigés et pratiques, cours et encadrer des projets en physique ont été, pour moi, de véritables respirations ainsi que des moments de bonheur et d'épanouissement.

Je remercie également Mr Abdallah Attaf, professeur et vice doyen de la faculté d'avoir accepté de siéger à mon jury.

Mes plus vifs remerciements vont à Mr Aissa Belgacem Bouzida, professeur à l'université de Batna, Mr Nadhir Attaf, professeur à l'université de Constantine, Mr Mohamed Tayeb Mefteh, Professeur à l'université de Ouargla et Mr Nacer Khelil, maître de conférence à l'université de Biskra. Qui ont été des interlocuteurs précieux et pour avoir accepté de faire partie du jury et avoir examiné ce travail avec un grand intérêt.

Table des matières

1	La Théorie Supersymétrique	8
1.1	Insuffisances du Modèle Standard (MS)	8
1.2	Supersymétrie	11
1.2.1	Principe	11
1.2.2	Formulation hamiltonienne de la MQSUSY	15
1.2.3	Brisure de la supersymétrie	25
1.3	Conclusion	32
2	Equation de Schrödinger dans un potentiel central	34
2.1	Etats d'une particule dans un potentiel central	34
2.1.1	Hamiltonien	34
2.1.2	Séparation des variables	36
2.1.3	Changement de fonction	37
2.1.4	Comportement à l'origine	38
3	Détermination des énergies et des états au moyen de la MQSUSY	40
3.1	Introduction	40
3.2	Etude analytique	41
3.3	Conclusion	60

4	Problème Inverse	62
4.1	Présentation du problème inverse	62
4.1.1	Historique	62
4.1.2	Définition	63
4.1.3	Théorie	64
4.1.4	Equation de Schrödinger	64
4.2	Différence de phase pour une diffusion élastique	65
4.2.1	Introduction	65
4.2.2	Formulation du problème de diffusion	67
4.2.3	Différence de Phase	70
4.3	Détermination du potentiel par inversion	72
4.3.1	Introduction	72
4.3.2	Inversion	73
4.3.3	Détermination de l'expression du potentiel $V_2(r)$	78
5	Le potentiel auxiliaire	81
5.1	Proposition du potentiel auxiliaire	81
5.1.1	Application numérique	83
5.1.2	Résultats et discussion	86
5.2	Le potentiel auxiliaire amélioré	87
5.2.1	Présentation du potentiel auxiliaire amélioré	87
5.2.2	Application numérique	89
5.2.3	Résultats et discussion	92

Introduction

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

Nous allons porter notre attention au début de ce travail à la formulation de l'équation de Schrödinger pour une situation physique bien précise, car l'étude d'un système physique consiste essentiellement à résoudre son équation de Schrödinger. En particulier, l'équation aux valeurs propres qui intervient directement dans les deux types de problèmes les plus fréquents en physique quantique, à savoir :

- La détermination des niveaux d'énergie des états liés.
- L'introduction des états de diffusion, qui se déduisent de la forme asymptotique des fonctions propres relatives aux états non liés.

En ce qui nous concerne nous allons aborder en premier lieu le problème des états liés, puis revenir en deuxième étape aux problèmes de diffusion. Cependant, les propriétés de symétrie que peut posséder l'Hamiltonien peuvent en faciliter la résolution. Dans ce but nous avons choisi d'utiliser une méthode assez prétentieuse et actuelle la supersymétrie (SUSY).

La théorie du modèle standard de la physique des particules décrit les interactions entre l'ensemble des particules élémentaires. Cette théorie a été merveilleusement confirmée expérimentalement, notamment avec la découverte du quark top en 1995 ($M_{top} = 175 \pm 6 \text{ GeV}$) [1]. Malgré le formidable accord des prédictions de cette théorie avec les résultats expérimentaux, il reste encore certaines lacunes qui ne peuvent être expliquées par le modèle standard. Ceci a poussé les physiciens à formuler de nouvelles théories allant au-delà du modèle standard. Un ensemble d'arguments conduit à envisager le modèle standard, non pas en tant que théorie fondamentale mais plutôt en tant que théorie effective valable à basse énergie. Actuellement, plusieurs extensions du modèle standard existent. Chacune possède ses vertus propres

en répondant partiellement à certaines interrogations. La supersymétrie constitue l'une de ces alternatives.

Une fois que les gens commençaient à étudier de divers aspects de la mécanique quantique supersymétrique (MQ SUSY), il était bientôt clair que ce champ ait été intéressant à son propre chef, pas seulement comme un modèle pour des méthodes d'essai de théorie de champ. On a réalisé que la SUSY donne la perspicacité dans la méthode de factorisation d'Infeld et Hull [2]. Graduellement une technologie entière a été évoluée, basée sur la SUSY pour comprendre les problèmes des potentiels solubles [3]. Au cours des 10 dernières années, les idées de la SUSY ont stimulé de nouvelles approches à d'autres branches de la physique, telles que des applications de la SUSY dans l'atomique, la matière condensée et la physique statistique [4].

De plus, l'utilisation des méthodes de la MQ SUSY, a également donné une dérivation du théorème d'index d'Atiyah-Singer [5]-[8]. Dans un autre développement, le rapport entre la SUSY et les équations différentielles telles que l'équation de Langevin ont été élucidées et exploitées par Parisi et Sourlas [9] et Cooper et Freedman [10].

Une formulation première et intégrale de la MQ SUSY était donnée par Salomonson et van Holten [10]. Plusieurs travaux se sont prolongés et les idées de la MQ SUSY dans des systèmes dimensionnels plus élevés aussi bien qu'à des systèmes avec un grand nombre de particules, ont été examinés avec une motivation pour comprendre les problèmes d'intérêt dans le domaine nucléaire, atomique, statistique et la physique des matières condensées [12]-[24].

En 1983, le concept d'un potentiel invariable de forme dans la structure de la MQ SUSY a été présenté par Gendenshtein [25]. Un potentiel aurait la forme invariable si son partenaire supersymétrique a la même dépendance spatiale que le potentiel original avec des paramètres probablement changés [3]. On l'a bientôt réalisé que le formalisme de la MQ SUSY plus l'invariance de forme ont été intimement reliés à la méthode de factorisation d'Infeld et Hull [2].

La méthode de factorisation a été présentée la première fois par Schrödinger [26] pour résoudre algébriquement le problème d'atome d'hydrogène. Plus tard, Infeld et Hull [2] ont généralisé cette méthode et ont obtenu une classe large des potentiels solubles en considérant six différentes formes de factorisation.

Il s'avère que la méthode de factorisation aussi bien que les méthodes de la MQ SUSY comprenant le concept de l'invariance de forme, sont les deux reformulations [27] de l'idée de

Riccati pour employer l'équivalence entre les solutions de l'équation de Riccati et l'équation différentielle linéaire de second ordre relative. Cette méthode a été employée pour la première fois par Bernoulli, et l'histoire est discutée en détail par Stahlhofen [28].

Dans un autre développement, plusieurs personnes ont prouvé que la MQ SUSY offre une manière simple d'obtenir des potentiels isospectraux en employant l'une des techniques de Darboux [29] ou d'Abraham-Moses [30] ou de Pursey [31], de ce fait offrir un aperçu du profond raccordement entre les méthodes de la diffusion inverse quantique [32], et la MQ SUSY [33]-[37]. Des méthodes approximatives basées sur la MQ SUSY ont été également développées. Trois sont considérables : l'expansion de $\frac{1}{N}$ en MQ SUSY [38], l'expansion de δ pour le superpotentiel [39] et la SUSY qui a inspiré l'approximation WKB (SWKB) dans la mécanique quantique pour le cas de la SUSY non brisée [40], [41] et [42].

Plusieurs aspects de l'équation de Dirac ont été également étudiés dans le formalisme de la MQ SUSY [43], [44] et [45]. Le problème célèbre de la particule de Dirac dans un champ coulombien a été également résolu algébriquement en employant les concepts de la SUSY et de l'invariance de forme [46]. La SUSY de l'électron de Dirac dans un champ magnétique monopole a été également étudié [47, 48].

Le formalisme de la MQ SUSY a été également récemment prolongé et les modèles pour la MQ parasupersymétrique [49, 50, 51], aussi bien que la MQ orthosupersymétrique [52] d'ordre arbitraire ont été notés. La question des superpotentiels singuliers a été également discutée de manière assez détaillée dans le formalisme de la MQ SUSY [53]-[57]. Très récemment il a été montré que la MQ SUSY offre une méthode systématique [58] pour construire les états liés dans le quantum [59], [60] et [61].

De même que c'est clair dans ce récit, plusieurs aspects de la MQ SUSY ont été explorés dans de grand détail en dix dernières années et il est presque impossible de couvrir toutes ces matières et de faire la justice appropriée à elles. Nous avons donc, décidé de ne pas prétendre d'être objectif mais couvrir seulement ceux des matières que nous pensons être importants.

Cette thèse est organisée en deux parties. Nous allons commencer par un chapitre introductif dont nous allons exposer la description actuelle de la physique des particules résumée dans le Modèle Standard puis nous passerons en revue quelques insuffisances intrinsèques. Ainsi la nécessité d'une nouvelle physique apparaîtra plus clairement.

Dans un second temps nous discuterons brièvement de l'algèbre de la supersymétrie et les supermultiplets. Nous y verrons notamment la formulation hamiltonienne de la MQ SUSY et nous terminons ce chapitre par un aperçu sur la notion de la brisure de supersymétrie.

Le chapitre 2 est un bref aperçu sur l'équation de Schrödinger dans un potentiel central.

Le chapitre 3 introduit de manière directe la détermination des états liés en utilisant la méthode SUSY.

Le chapitre 4 traite principalement les états de diffusion, cette partie est l'inverse de la précédente, car elle utilise l'équation de Schrödinger pour un système de diffusion élastique, dans le but d'identifier le potentiel par la méthode « phase intégrale » lorsque l'énergie et la fonction d'onde (ou les différences de phases) sont connues. Notre problème converge vers l'idée de l'identification du potentiel de certains atomes du type alcalins. Ainsi le potentiel d'interaction peut être représenté par deux composantes : la première composante attractive qui décrit l'attraction de VAN DER WAALS est déjà bien connue [62] et la deuxième est répulsive et qui provient de l'échange des électrons. Le terme d'échange qui est exprimé sous forme d'une fonction exponentielle est moins bien connu et, du point de vue théorique, il serait peut être intéressant de développer une méthode qui permet de le déterminer d'une manière plus rationnelle.

Dans ce sens nous avons choisi de commencer par la description de la théorie du problème inverse dans la première section du chapitre 4, ceci servira comme un support déterminant dans la suite du travail. L'introduction des différences de phase pour une diffusion élastique est exposée dans la section qui suit. La détermination du potentiel inconnue par inversion est traitée dans la troisième section.

Nous terminons par un cinquième chapitre, dont nous allons montrer dans la première section la possibilité d'inclure un potentiel auxiliaire avec une certaine manipulation . La seconde section, propose un potentiel auxiliaire amélioré menant à une nouvelle forme du potentiel. Enfin ce travail est achevé par une conclusion générale.

Partie I

Les états liés

Chapitre 1

La Théorie Supersymétrique

Cette section a pour but d'exposer les principes généraux qui régissent toute théorie supersymétrique. Un accent est mis en premier sur l'insuffisance du modèle standard puis on essaye de présenter, sans démonstration, la structure générale d'une théorie supersymétrique, en commençant par l'algèbre tout d'abord ainsi que les superchamps.

Nous fournirons les éléments théoriques suffisants pour mieux comprendre les nombreux concepts de base du formalisme d'un Hamiltonien SUSY. Enfin, la question de la brisure de supersymétrie est discutée. Cette section se veut introductive et non exhaustive.

A l'issue de cette section, nous devrions posséder suffisamment de bagage pour comprendre comment la SUSY se présente en étudiant les aspects concrets comme les prédictions expérimentales.

1.1 Insuffisances du Modèle Standard (MS)

Le constat expérimental précédent, en faveur du MS, confronté au constat théorique suivant est source d'étonnements dans la communauté des physiciens des particules. En effet, le MS n'explique pas, par exemple, les nombres quantiques des particules (charge électrique, isospin faible, couleur,...), ne prédit pas le spectre de masse ni n'inclut l'interaction gravitationnelle. Passons un peu de temps sur chaque point pour mieux comprendre pourquoi le Modèle Standard ne peut pas être la description ultime de la nature.

Oscillation des neutrinos

En 1998 l'expérience KEK au Japon, a mis en évidence la présence d'une oscillation des neutrinos solaires [63]. Ceci implique d'un point de vue théorique que les neutrinos ont une masse non nulle. Une modification du Modèle standard (postulant une masse nulle aux neutrinos) est donc nécessaire. On introduit à cet effet un neutrino droit, noté N_R [64]. L'explication la plus simple aux neutrinos massifs fait intervenir un mécanisme dit de "balance" [65] - [68]. Dans ces modèles, non seulement le neutrino a une masse, mais on explique aussi pourquoi les masses des neutrinos gauches sont bien plus faibles que celles des autres fermions. Si on part d'un terme de masse d'un type utilisé dans les références suivant [66], [69] et [70] (c'ad des neutrinos de Dirac) et après une diagonalisation de la matrice de masse aux masses des 2 états physiques de chiralité gauche (m_-) et droite (m_+) [71] aboutit à :

$$m_{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ m_L + m_R \pm \sqrt{(m_L + m_R)^2 + 4m_D^2} \right\} \quad (1.1)$$

m_R est de l'ordre de grandeur de la brisure de la symétrie gauche-droite et donc typiquement celui des modèles de grande unification. Quant au terme de masse de Dirac , il est du même ordre de grandeur que les autres fermions [71]. Dans ce cas :

$$m_+ \approx m_R, m_- \approx \frac{m_D^2}{m_R} \quad (1.2)$$

Ce mécanisme de balançoire conduit donc naturellement à des masses de neutrinos gauches très petites et à l'existence de neutrinos de grande masse ce qui constitue une motivation pour aller au-delà du modèle standard.

La gravitation

Le Modèle Standard ne donne pas de description quantique de la théorie de la gravité. En fait, l'interaction gravitationnelle est ajoutée, juxtaposée au MS sous sa forme actuelle c'est-à-dire la Relativité Générale (RG). Cela ne pose pas de problème à l'échelle d'énergie qui nous est accessible actuellement puisque la force gravitationnelle y est considérablement plus faible que l'interaction faible. Mais pour des énergies autour de 10¹⁹ GeV, elle est de même intensité et nous ne pouvons plus la traiter classiquement via la RG.

De plus, certains phénomènes cosmologiques sont insuffisamment expliqués et il faut intro-

duire d'autres paramètres libres, non prédits par la théorie. La quantification de la gravitation, dans sa version quantique, est depuis longtemps une des préoccupations principales des physiciens théoriciens. La difficulté vient notamment de sa non-renormalisabilité.

La matière noire

Au début des années 90, les astronomes ont fait une découverte très importante pour les physiciens des particules : l'existence de matière noire. Ils ont observé que la densité de matière connue (baryonique) ne représentait que moins de 4% de la densité totale de l'Univers. 20% de la densité totale viendrait d'une matière non baryonique qui n'existe pas dans le MS, ce que l'on appelle la matière noire. Pire encore, le reste nous est totalement inconnu et on l'attribue à une sorte d'énergie noire (elle est appelée ainsi car elle n'est pas due à la matière). Tous les modèles au-delà du MS contiennent des particules nouvelles et celles-ci, à condition d'être stables, neutres et sans interactions fortes, peuvent jouer le rôle de matière noire. La supersymétrie offre par exemple un candidat très sérieux, le neutralino. Par contre, l'énergie noire est aujourd'hui un mystère total et son explication ne peut se trouver que dans les modèles qui incluent la gravitation.

La hiérarchie des échelles

Si nous regardons le domaine des énergies, il s'étend jusqu'à 10¹⁹ GeV où la gravité n'est plus négligeable dans les interactions entre particules. Une question se pose alors, pourquoi y a-t-il 17 ordres de grandeurs qui séparent l'échelle électrofaible de l'échelle de Planck ?! Là non plus le MS ne donne pas de réponse, et c'est même l'un des plus grands défis de la physique moderne. Peu de modèles apportent une explication satisfaisante. A plus petite échelle, la même observation peut être faite à propos des masses de fermions connus. L'introduction de dimensions spatiales supplémentaires pourrait donner une réponse au problème mais ce n'est souvent qu'une reformulation qu'elles proposent. Clairement, il reste des mystères qui nécessitent un autre modèle qui prendra le relais du Modèle Standard pour la physique à plus haute énergie.

L'ensemble de ces arguments conduit à envisager le modèle standard, non pas en tant que théorie fondamentale mais plutôt en tant que théorie effective valable à basse énergie. Actuellement, plusieurs extensions du modèle standard existent. Chacune possède ses vertus

propres en répondant partiellement à certaines des interrogations précédentes. La supersymétrie constitue l'une de ces alternatives.

1.2 Supersymétrie

1.2.1 Principe

Origine des théories supersymétriques

Deux grandes classes de symétries sont à distinguer en Physique : Les symétries d'espace-temps (réunies dans le groupe de Poincaré) et les symétries internes qui se classent en deux sous-catégories, à savoir les symétries globales (saveur, chirale) et les symétries de jauge (couleur, électrofaible). Les premières tentatives d'unification de ces deux genres de symétries furent non relativistes. Ces modèles concernaient les quarks et rassemblaient le groupe $SU(2)$ de spin et $SU(3)$ de saveur dans un groupe $SU(6)$. En 1967, Coleman et Mandula furent à l'origine d'un théorème [72] qui est le plus précis et le plus puissant d'une série de "no-go theorems" traitant des symétries possibles de la matrice S , dans le cadre de la théorie quantique des champs : D'après ce théorème, si G est un groupe de symétrie connexe de la matrice S qui contient le groupe de Poincaré, qui met un nombre fini de particules dans un supermultiplet et qui a des générateurs pouvant être représentés comme des opérateurs d'intégration dans l'espace des moments (avec des noyaux qui sont des distributions), si la matrice S n'est pas triviale et si les amplitudes de diffusion élastique sont des fonctions analytiques de s et t dans un voisinage de la région physique, alors G est localement isomorphe au produit direct du groupe de Poincaré et d'un groupe de symétrie interne. En 1971, Gol'fand et Likhtman montrèrent que l'algèbre d'une extension du groupe de Poincaré devait être graduée (qui contiennent à la fois des commutateurs et des anticommutateurs) afin de ne pas violer la connection entre le spin et la statistique [73]. Une algèbre graduée comprend des générateurs B_i , appartenant à une algèbre de Lie, et des générateurs F_i , obéissant à des relations d'anti-commutation entre eux et à des relations de commutation avec les B_i :

$$[B_i, B_j] \sim B_k, [B_i, F_j] \sim F_k, \{F_i, F_j\} \sim B_k.$$

Si l'on considère une extension du groupe de Poincaré, les B_i représentent les générateurs du groupe de Poincaré ($SO(1, 3) \times \text{Translations}$). La seconde relation permet à l'extension obtenue de ne pas être trivialement un produit direct entre le groupe de Poincaré et le groupe associé aux générateurs F_i . Ces générateurs F_i , ne commutant pas avec les transformations de Lorentz, changent le spin des particules. Les générateurs F_i possèdent donc un spin contrairement aux B_i , d'où la notation (B_i pour bosonique et F_i pour fermionique). De plus, le théorème de Coleman-Mandula supprime la possibilité de prendre les F_i de spin entier. Ce nouveau groupe échange donc les fermions et les bosons introduisant ainsi une nouvelle symétrie. Notons que cette symétrie Bose-Fermi a aussi été introduite en 1971 par Neveu, Schwarz et Ramond, dans des modèles de cordes pour les fermions. Haag, Sohnius et Lopuszanski prouvèrent ensuite que l'algèbre de supersymétrie (ou superalgèbre) était la seule algèbre graduée généralisant le groupe de Poincaré, compatible avec une théorie quantique des champs [74, 75]. L'introduction de représentations linéaires de la supersymétrie dans le contexte de la théorie quantique des champs fut donnée la première fois par Wess et Zumino en 1974 [76]. Peu après, Ferrara, Salam, Strathdee, Wess et Zumino inventèrent le formalisme des superspaces et superchamps [77] - [81]. Depuis le début des années 1980, des efforts importants ont été investis dans le développement de la supersymétrie tant sur le plan expérimental que théorique. Aucun partenaire supersymétrique d'une particule du Modèle Standard, c'est à dire aucune particule supersymétrique, n'a cependant été découvert à ce jour.

Fermions et bosons

Boson : Les bosons sont des particules qui ne doivent pas satisfaire le principe d'exclusion de Pauli. Elles peuvent donc être nombreuses à occuper le même état quantique. On peut considérer des opérateurs bosoniques de création et d'annihilation, qui ont respectivement pour effet de créer et annihiler une particule dans un état quantique donné.

Fermion : Par opposition aux bosons, les fermions sont des particules qui doivent satisfaire le principe d'exclusion de Pauli. Dans un état donnée, il ne peut donc y avoir que 0 ou 1 fermion.

La Supersymétrie n'est rien d'autre qu'une symétrie supposée entre fermions (spin 1/2

ou $3/2$) et bosons (spin entier = 0, 1 ou 2), "elle associe à chacun de ces états de l'électron un partenaire qui ne s'en distingue que par son spin. C'est une symétrie que rien ne suggère dans l'expérience pour l'instant mais seulement dans les formules mathématiques. Le spin est mal compris encore, c'est une sorte d'axe de rotation dont l'orientation peut changer. La valeur donnée représente le nombre d'orientations par lesquelles il faut passer pour revenir à l'état initial (un électron, qui est un fermion de spin $1/2$, peut prendre 2 orientations **up** ou **down**). Un boson est une particule d'interaction qui transporte de l'énergie (la plupart du temps à des vitesses proches de celles de la lumière), c'est simplement la transmission d'une force, le quanta d'un champ dont le meilleur exemple est le photon. Les fermions (quarks ou électrons) constituent la matière elle-même, localisée (deux fermions ne peuvent occuper la même place) contrairement aux bosons que tout semble opposer. Pour compliquer le tout il faut savoir qu'une paire de fermions (spin $1/2$) est l'équivalente d'un boson (spin 1)! (ce qu'on vérifie avec les condensats de Bose-Einstein). Postuler une symétrie des équations entre bosons et fermions ne va donc pas de soi, surtout que les superparticules supposées brillent par leur absence dans l'état actuel de nos expériences (tout comme les antiparticules qui ont été déduites avant d'être observées). On comprendrait mieux, peut-être, si on parlait de symétries entre paires de particules, mais la supersymétrie est l'hypothèse entièrement spéculative que s'il existe un fermion, comme l'électron, il doit pouvoir exister un boson ayant les mêmes propriétés (énergie et charge), à l'exception du spin (ou de la masse), et qu'on nomme sélectron (ou squark pour les quarks) en faisant précéder la particule existante d'un "s". De même pour tout boson, comme le photon, devrait pouvoir exister un équivalent fermion appelé photino (en utilisant le suffixe "ino"). Si tout cela reste à prouver, il y a bien une liaison nécessaire entre fermions et bosons, interaction matérielle et particule médiatrice, mais c'est entre l'électron et le photon, pas entre l'électron et le sélectron (les photons ne servent pourtant pas seulement aux interactions électriques puisqu'ils transmettent de l'inertie comme dit Einstein, mais ils transmettent aussi de l'énergie cinétique et de la chaleur, participant à l'équilibre thermodynamique de l'univers).

Si une particule porte une charge, alors, pour construire une théorie quantique cohérente, il faut nécessairement introduire un champ supplémentaire qui interagisse avec cette particule Les photons existent parce que les électrons existent. L'existence du photon a trouvé son explication. Grâce au modèle standard, nous comprenons enfin d'où vient la lumière.

Pour qu'elles soient interchangeable, les particules d'une même paire doivent avoir la même masse, car les équations en dépendent. Or pour des raisons techniques, il se trouve que cela n'est possible que si toutes les particules sont de masse nulle. Malheureusement cela ne colle pas avec les données : toutes les particules ont bel et bien une masse. C'est ici que le boson de Higgs entre dans la danse.

Dans notre espace-temps habituel, bosons et fermions se comportent différemment, mais il se trouve qu'en associant à nos quatre dimensions d'espace-temps usuelles quatre autres "dimensions" (sans aucune extension!), on peut inclure les différences entre fermions et bosons dans la structure de "l'espace". C'est ainsi que l'on définit le "superespace". Il s'agit d'une structure géométrique dans laquelle bosons et fermions admettent une description parfaitement symétrique. Dans le superespace, bosons et fermions s'envisagent comme deux projections différentes d'un même objet, un peu comme l'électron et le neutrino dans un espace interne bien choisi.[79]

Motivation de la supersymétrie

Quelles sont aujourd'hui les motivations pour la supersymétrie ? Tout d'abord, la supersymétrie (*SUSY*) apporte un cadre particulièrement propice aux théories de grande unification dites théories **GUT** (*Grand Unification Theory*) [83, 84, 85, 86] ainsi qu'aux modèles d'unification des forces incluant la gravitation vers $10^{19} GeV$: Les théories de cordes (supercordes si elles incluent *SUSY*). Dans le modèle *GUT* supersymétrique basé sur le groupe de jauge $SU(5)$, si l'échelle effective de brisure de la supersymétrie est de l'ordre du TeV , les trois constantes de couplage du Modèle Standard s'unifient à l'échelle d'unification M_{GUT} , ce qui n'est pas le cas dans le modèle non supersymétrique *GUT* basé sur le groupe de jauge $SU(5)$. De plus, dans le modèle *GUTSU(5)* supersymétrique, l'échelle d'unification est repoussée de $M_{GUT} \approx 10^{15} GeV$ (cas du modèle *GUTSU(5)* non supersymétrique) à $M_{GUT} \approx 2.10^{16} GeV$ ce qui augmente le temps de vie du proton. Notons cependant que dans les théories *SUSY*, la stabilité du proton est menacée par des opérateurs non renormalisables. Par ailleurs, *SUSY* offre un candidat naturel pour la masse cachée de l'Univers : La **LSP** (*Lightest Supersymmetric Particle*), qui est la particule supersymétrique la plus légère. En effet, la LSP est stable (excepté dans les scénarios dans lesquels la symétrie de R-parité est violée, et interagit faiblement avec la matière. Mais la

principale motivation pour les théories *SUSY* reste la résolution du problème des hiérarchies d'échelles de masse comme nous l'avons déjà mentionné précédemment.

1.2.2 Formulation hamiltonienne de la MQSUSY

Commutation et anticommutation

Le commutateur de deux opérateurs A et B se calcule de la manière suivante [87] :

$$[A, B] = AB - BA \quad (1.3)$$

On définit également leur anticommutateur

$$\{A, B\} = AB + BA \quad (1.4)$$

Sur ce principe et on se basant sur ce qui a été décrit précédemment, on peut également définir des opérateurs fermioniques de création et d'annihilation¹ (que nous noterons respectivement f^+ et f). Ceux-ci satisfont les relations d'anticommutation

$$\{f^\dagger, f\} = 1, \{f^\dagger, f^\dagger\} = \{f, f\} = 0 \quad (1.5)$$

De la même manière que les opérateurs bosoniques a et a^\dagger satisfont les relations de commutation

$$[b, b^\dagger] = 1, [b^\dagger, b^\dagger] = [b, b] = 0 \quad (1.6)$$

Remarque : Note sur les opérateurs bosoniques et fermioniques

L'état d'une particule est décrit par un vecteur d'un espace de Hilbert. Si on s'intéresse non pas à une seule particule, mais à un système constitué d'un nombre indéterminé ou variable de particules, on le décrit par un vecteur d'un espace de Fock associé à l'espace de Hilbert.

¹Le non donné à ces opérateurs n'est pas dépourvu de sens car celui de création augmente les valeurs propres, et d'annihilation les diminue.

La procédure par laquelle on peut traiter ce genre de systèmes à partir des particules prises individuellement porte le nom de “seconde quantification” [88].

La SUSY pour l’étude de potentiels à une dimension

Cette section peut être considérée comme une première étape importante pour la découverte de nouveaux potentiels analytiquement solubles. Nous y verrons comment, à partir d’un potentiel donné, générer ses “superpartenaires”.

Il est connu maintenant que l’Hamiltonien Supersymétrique H_S d’un système de combinaison de bosons et fermions est écrit comme la somme de l’hamiltonien bosonique H_B et fermionique H_F [89],

$$H_S = H_B + H_F \tag{1.7}$$

En substituant les superpartenaires hamiltoniens H_+ et H_- [90]

$$H_S = \begin{pmatrix} H_- & 0 \\ 0 & H_+ \end{pmatrix} \tag{1.8}$$

Pour l’Hamiltonien à une dimension H_1 , il est redéfini comme H_+ dans l’eq (1.8).

Un des ingrédients principaux pour la résolution exacte des problèmes d’un potentiel dimensionnel est le raccordement entre les fonctions d’onde et le potentiel. Ce n’est pas toujours évident de connaître exactement le potentiel (jusqu’ à une constante) juste en connaissant la fonction d’onde de l’état fondamental (ou toute autre fonction d’onde d’un autre état).

Le non donné à ces opérateurs n’est pas dépourvu de sens car celui de création augmente les valeurs propres, et d’annihilation les diminue

Soit l’Hamiltonien d’une particule

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) \tag{1.9}$$

On va voir ici qu’il est possible de déterminer le potentiel $V_1(x)$ si l’on connaît l’état fondamental [91]. Si $\psi_0(x)$ (l’état fondamental) tend vers zéro pour $x \rightarrow \pm\infty$ et ne possède aucun

noeud, et si on choisit l'énergie de l'état fondamental de l'Hamiltonien H_1 comme étant zéro ($E_0^{(1)} = 0$). Alors on a l'équation de Schrödinger de la fonction d'onde de l'état fondamental $\psi_0(x)$:

$$H_1\psi_0(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_0}{dx^2} + V_1(x)\psi_0(x) = 0 \quad (1.10)$$

A partir de cette équation, on trouve facilement une expression de V_1

$$V_1(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)} \quad (1.11)$$

Une fois que nous réalisons ceci, il est maintenant très simple de factoriser l'hamiltonien en utilisant :

$$H_1 = A^\dagger A \quad (1.12)$$

où

$$A = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x) \quad , \quad A^\dagger = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x) \quad (1.13)$$

Les opérateurs de création et d'annihilation A^\dagger et A sont une généralisation des opérateurs b^\dagger et b que nous avons cité précédemment.

Ceci nous permet d'identifier.

$$V_1(x) = W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \quad (1.14)$$

Cette équation est l'équation bien connue de **Riccati**. Où $W(x)$ est généralement connu sous le nom de "**superpotentiel**" en littérature de la MQ SUSY . La solution pour $W(x)$ en termes de fonction d'onde d'état fondamental est :

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} \quad (1.15)$$

Cette solution est obtenue à condition que $A\psi_0 = 0$ est satisfaite, nous avons automatiquement une solution $H_1\psi_0 = A^\dagger A\psi_0 = 0$. La prochaine étape en construisant la théorie SUSY liée

à l'hamiltonien original H_1 est de définir l'opérateur $H_2 = AA^\dagger$ obtenu en renversant l'ordre de A et de A^\dagger . Une peu de simplification prouve que l'opérateur H_2 est en fait la correspondance hamiltonienne à un nouveau potentiel $V_2(x)$.

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) \quad , \quad V_2(x) = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \quad (1.16)$$

Les potentiels $V_1(x)$ et $V_2(x)$ sont connus en tant que les potentiels partenaires supersymétriques ou encore **les potentiels "SUSY-partenaires"**.

Notez que les valeurs propres d'énergie de H_1 et de H_2 sont semi-définies positif ($E^{(1,2)} \geq 0$). Pour $n > 0$, l'équation de Schrödinger pour H_1

$$H_1 \psi_n^{(1)} = A^\dagger A \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} \quad (1.17)$$

implique

$$H_2 \left(A \psi_n^{(1)} \right) = AA^\dagger A \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \left(A \psi_n^{(1)} \right) \quad (1.18)$$

De la même façon, l'équation de Schrödinger pour H_2

$$H_2 \psi_n^{(2)} = AA^\dagger \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \psi_n^{(2)} \quad (1.19)$$

Implique

$$H_1 \left(A^\dagger \psi_n^{(2)} \right) = A^\dagger AA^\dagger \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \left(A^\dagger \psi_n^{(2)} \right) \quad (1.20)$$

D'après les éqs (1.15) et (1.20) et du fait que $E_0^{(1)} = 0$, il est clair que les valeurs propres et les fonctions propres des deux hamiltoniens H_1 et H_2 sont reliées par

$$E_n^{(2)} = E_{n+1}^{(1)} \quad , \quad E_0^{(1)} = 0 \quad (1.21)$$

$$\psi_n^{(2)} = \frac{A \psi_{n+1}^{(1)}}{\sqrt{E_{n+1}}} \quad (1.22)$$

$$\psi_{n+1}^{(1)} = \frac{A^\dagger \psi_n^{(2)}}{\sqrt{E_n^{(2)}}} \quad (1.23)$$

($n = 0, 1, 2, \dots$)

Notez que si $\psi_{n+1}^{(1)}$ ($\psi_n^{(2)}$) de H_1 (H_2) est normalisé alors la fonction d'onde $\psi_n^{(2)}$ ($\psi_{n+1}^{(1)}$) dans les éqs. (1.22) et (1.23) est également normalisé. De plus, ces relations nous montrent que si l'on connaît toutes les fonctions propres de H_1 , on peut déterminer les fonctions propres de H_2 en appliquant l'opérateur A , et si l'on connaît toutes les fonctions propres de H_2 , on peut déterminer les fonctions propres de H_1 (mis à part l'état fondamental, qui n'a pas de SUSY-partenaire) en appliquant l'opérateur A^\dagger .

l'opérateur A (A^\dagger) convertit non seulement une fonction propre de H_1 (H_2) à une fonction propre de H_2 (H_1) avec la même énergie, mais elle détruit également (crée) un noeud supplémentaire dans la fonction propre. Puisque la fonction d'onde de l'état fondamental de H_1 est annihilée par l'opérateur A cet état n'a aucun partenaire de SUSY. Ainsi l'image que nous obtenons est que en sachant toutes les fonctions propres de H_1 nous pouvons déterminer les fonctions propres de H_2 en utilisant l'opérateur A et vice versa en utilisant A^\dagger nous pouvons reconstruire toutes les fonctions propres de H_1 de ceux de H_2 excepté l'état fondamental. Ceci est illustré dans la figure. (1-1),

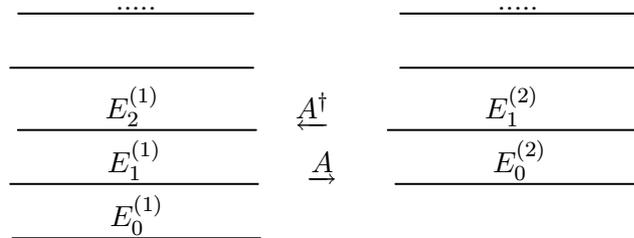


Fig (1-1) : Action des opérateurs A et A^\dagger

La raison fondamentale de la dégénérescence des spectres de H_1 et de H_2 peut être comprise très facilement des propriétés de l'algèbre de SUSY. On peut maintenant écrire et considérer une matrice hamiltonienne SUSY de la forme

$$H = \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

Cette matrice hamiltonienne fait partie d'une algèbre fermée qui contient les opérateurs bosoniques et fermioniques avec des relations de commutation et d'anti-commutation (voir l'algèbre précédemment). Nous considérons les opérateurs supercharges Q et Q^\dagger (déjà rencontrés lors de l'étude de l'algèbre SUSY) sous la forme $Q = Af^\dagger$ et $Q^\dagger = A^\dagger f$ dans un cadre général[92], ce qui est équivalent à

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

$$Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.26)$$

de par la généralisation des opérateurs de création et d'annihilation.

Dans ce contexte, l'effet de Q et de Q^\dagger est de relier les fonctions d'onde de H_1 et H_2 .

Les relations suivantes de commutation et d'anticommutation décrivent la superalgèbre fermée $sl(1/1)$:

$$[H, Q] = [H, Q^\dagger] = 0 \quad , \quad \{Q, Q^\dagger\} = H \quad , \quad \{Q, Q\} = \{Q^\dagger, Q^\dagger\} = 0 \quad (1.27)$$

Le fait que les supercharges Q et Q^\dagger commutent avec H c'est le responsable de la dégénérescence. Les opérateurs Q et Q^\dagger peuvent être interprétés comme opérateurs qui changent des degrés de liberté bosoniques au fermioniques et vice versa. Ceci est élaboré au plus loin dans les exemples de l'oscillateur harmonique de SUSY (Voir réf [3, 92]).

Factorisation et Hiérarchies d'Hamiltoniens

Dans ce qui précède nous avons trouver qu'une fois qu'on connaît la fonction d'onde de l'état fondamental qui correspond à H_1 , on peut trouver le superpotentiel de l'éq (1.15). On sait aussi que la fonction d'onde de l'état fondamental du partenaire hamiltonien H_2 est déterminée par le premier état excité H_1 en appliquant l'opérateur A_1 , donc on vient de voir qu'on peut déterminer

H_2 si l'on connaît H_1 . On peut dès lors aussi refactoriser H_2 pour déterminer son partenaire H_3 , puis refactoriser H_3 pour déterminer son partenaire H_4 , et ainsi de suite. Chaque nouvel Hamiltonien a un état lié de moins que le précédent.

Pour simplifier on prend $\hbar = 2m = 1$

$$H_1 = A_1^\dagger A_1 + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) \quad (1.28)$$

où

$$A_1 = \frac{d}{dx} + W_1(x) \quad , \quad A_1^\dagger = -\frac{d}{dx} + W_1(x) \quad , \quad W_1(x) = -\frac{d \ln(\psi_0^{(1)})}{dx} \quad (1.29)$$

Le partenaire SUSY Hamiltonien est donné alors

$$H_2 = A_1 A_1^\dagger + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) \quad (1.30)$$

où

$$V_2(x) = W_1^2 + W_1' + E_0^{(1)} = V_1(x) + 2W_1' = V_1(x) - 2\frac{d^2}{dx^2} \ln \psi_0^{(1)} \quad (1.31)$$

On doit introduire la notion $E_n^{(m)}$, n est le niveau d'énergie et (m) réfert le m 'ième hamiltonien H_m . Les valeurs propres et les fonctions propres des deux hamiltoniens H_1 et H_2

$$E_{n+1}^{(1)} = E_n^{(2)} \quad , \quad \psi_n^{(2)} = \left(E_{n+1}^{(1)} - E_0^{(1)}\right)^{-1/2} A_1 \psi_{n+1}^{(1)} \quad (1.32)$$

Maintenant commençant par H_2 dont l'énergie fondamentale est $E_0^{(2)} = E_1^{(1)}$, on peut simuler généralement le troisième hamiltonien H_3 comme le partenaire SUSY de H_2 , d'après ceci nous pouvons écrire H_2 sous la forme

$$H_2 = A_1 A_1^\dagger + E_0^{(1)} = A_2^\dagger A_2 + E_1^{(1)} \quad (1.33)$$

où

$$A_2 = \frac{d}{dx} + W_2(x) \quad , \quad A_2^\dagger = -\frac{d}{dx} + W_2(x) \quad , \quad W_2(x) = -\frac{d \ln(\psi_0^{(2)})}{dx} \quad (1.34)$$

On continuant de la même manière on obtient

$$H_3 = A_2 A_2^\dagger + E_1^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_3(x) \quad (1.35)$$

où

$$V_3(x) = W_2^2 + W_2' + E_1^{(1)} = V_2(x) - 2\frac{d^2}{dx^2} \ln \psi_0^{(2)} = V_1(x) - 2\frac{d^2}{dx^2} \ln \left(\psi_0^{(1)} \psi_0^{(2)} \right) \quad (1.36)$$

En outre

$$\begin{aligned} E_n^{(3)} &= E_{n+1}^{(2)} = E_{n+2}^{(1)} \\ \psi_n^{(3)} &= \left(E_{n+1}^{(2)} - E_0^{(2)} \right)^{-1/2} A_2 \psi_{n+1}^{(2)} \\ &= \left(E_{n+2}^{(1)} - E_1^{(1)} \right)^{-1/2} \left(E_{n+2}^{(1)} - E_0^{(1)} \right)^{-1/2} A_2 A_1 \psi_{n+2}^{(1)} \end{aligned} \quad (1.37)$$

De cette manière, c'est clair que si l'Hamiltonien d'origine H_1 a un nombre p d'états liés, aux valeurs propres $E_n^{(1)}$ et aux fonctions propres $\psi_n^{(1)}$ avec $0 \leq n \leq (p-1)$, alors on peut toujours générer une hiérarchie de $(p-1)$ Hamiltoniens H_1, H_2, \dots, H_p telle que H_m (où $m = 2, 3, \dots, p$) a le même spectre de valeurs propres que H_1 , à part que H_m n'a pas les $(m-1)$ premières valeurs propres de H_1 [91]. Pour $m = 2, 3, \dots, p$, H_m est alors donné par la relation suivante :

$$H_m = A_m^\dagger A_m + E_{m-1}^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_m(x) \quad (1.38)$$

où

$$A_m = \frac{d}{dx} + W_m(x) \quad , \quad W_m(x) = -\frac{d \ln \left(\psi_0^{(m)} \right)}{dx} \quad (1.39)$$

on a aussi les relations

$$E_n^{(m)} = E_{n+1}^{(m-1)} = \dots = E_{n+m-1}^{(1)} \quad (1.40a)$$

$$\psi_n^{(m)} = \left[\left(E_{n+m-1}^{(1)} - E_{m-2}^{(1)} \right)^{-1 \setminus 2} \dots \left(E_{n+m-1}^{(1)} - E_0^{(1)} \right)^{-1 \setminus 2} \right] A_{m-1} \dots A_1 \psi_{n+m-1}^{(1)} \quad (1.40b)$$

$$V_m(x) = V_1(x) - 2 \frac{d^2}{dx^2} \ln \left(\psi_0^{(1)} \dots \psi_0^{(m-1)} \right) \quad (1.40c)$$

Dans ce chemin, connaître tout les valeurs propres et fonctions propres de H_1 on sera directement tout les valeurs propres d'énergie et fonctions propres de la hiérarchie de $p - 1$ Hamiltonien.

La SUSY pour les potentiels de n -dimensions

Jusqu'ici nous avons discuté la MQ SUSY sur la ligne complète ($-\infty < x < \infty$) . Plusieurs de ces résultats sont analogues pour les potentiels à n -dimensions avec symétrie sphérique. Par exemple, dans trois dimensions on peut faire une expansion partielle de l'onde en termes de fonctions d'onde [93, 94, 95, 96, 97] :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_l(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.41)$$

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

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] R_l(r) = ER_l(r) \quad (1.42)$$

où $p_r^2 \equiv -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r$. Comme nous l'avons déjà signalé dans l'expression de l'Hamiltonien que la valeur $r = 0$ n'est pas forcément valable. Il faudra donc s'assurer que le comportement à l'origine des solutions $R_l(r)$ est suffisamment régulier pour que (1.41) soit effectivement une solution de l'équation de Schrödinger. Posons en effet :

$$R_{k,l}(r) = \frac{1}{r} U_{k,l}(r) \quad (1.43)$$

L'indice k , qui peut être discret ou continu, permet de repérer les différentes valeurs propres associées à la même valeur de l . En multipliant les deux membres de (1.42) par r , on obtient pour $U_{k,l}(r)$ l'équation différentielle suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] U_{k,l}(r) = E U_{k,l}(r) \quad (1.44)$$

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

$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(r) \right) \Psi = E \Psi \right]$ sauf qu'à l'énergie potentielle $V(r)$ s'ajoute un terme $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ que l'on peut appeler terme de force centrifuge et qui disparaît pour $l = 0$. On conclut, la formulation SUSY sera la même que pour une dimension sauf qu'il faut avant de formuler trouver le comportement à l'origine et asymptotique des solutions.

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

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

Considérons une solution de (1.42) et supposons qu'elle se comporte à l'origine comme r^s :

$$R_{k,l}(r)_{r \rightarrow 0} = C r^s \quad (1.45)$$

En reportant (1.45) dans (1.42) et en égalant à zéro le coefficient du terme dominant, on obtient l'équation : $-s(s+1) + l(l+1) = 0$ et par suite : $s = +l$, $s = -(l+1)$. Pour une valeur donnée de $E_{k,l}$, on peut donc trouver deux solutions linéairement indépendantes de l'équation (1.42). Les solutions acceptables de l'équation (1.42) s'annulent à l'origine quelque soit l , puisque :

$$U_{k,l}(r)_{r \rightarrow 0} \sim C r^{l+1} \quad (1.46)$$

Par conséquent, il faut adjoindre à l'équation (1.44) la condition :

$$U_{k,l}(0) = 0 \quad (1.47)$$

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

• **Comportement asymptotique** ($r \rightarrow \infty$)

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

$\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) = 0$, l'équation (1.44) se réduit à :

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{k,l}(r) + K^2 U_{k,l}(r)_{r \rightarrow \infty} \simeq 0 \quad (1.48)$$

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

$$\begin{aligned} \text{si } E_{k,l} < 0 & : U_{k,l}(r)_{r \rightarrow \infty} \sim \exp(-xr) \text{ où } x = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \\ \text{si } E_{k,l} > 0 & : U_{k,l}(r)_{r \rightarrow \infty} \sim A \exp(ikr) + B \exp(-ikr) \end{aligned} \quad (1.49)$$

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

1.2.3 Brisure de la supersymétrie

Nous en déduisons que si la nature est effectivement supersymétrique, les masses des partenaires supersymétrique sont supérieures aux masses des particules du Modèle Standard et la supersymétrie est donc brisée. Quels sont les critères de brisure spontanée de la supersymétrie ? La supersymétrie est brisée spontanément si le vide n'est pas invariant sous la supersymétrie.

En fait, une brisure spontanée de la supersymétrie dans le secteur observable engendre une hiérarchie entre les masses des particules qui n'est pas réaliste [98]. Plus précisément, après

une brisure spontanée de la supersymétrie, les masses des particules fermioniques du Modèle Standard sont supérieures à certaines des masses de leur partenaire supersymétrique scalaire.

La supersymétrie si elle existe doit donc subir une brisure spontanée dans un secteur différent du secteur observable, appelé secteur “caché”, et cette brisure de $SUSY$ doit être médiée au secteur observable. Il existe aujourd’hui deux principaux types de modèles dans lesquels ce scénario de brisure de $SUSY$ peut être réalisé : Les modèles de supergravité et les modèles dits $GMSB$ (*Gauge Mediated Supersymmetry Breaking*) [99]. Dans les modèles de supergravité, le secteur caché n’interagit avec le secteur observable que par les interactions de type gravitationnel, et par conséquent la brisure de $SUSY$ est médiée au secteur observable par les interactions de gravitationnelles. Dans les modèles $GMSB$, le secteur caché n’interagit avec le secteur observable que par les interactions de jauge, et par conséquent la brisure de $SUSY$ est médiée au secteur observable par les interactions de jauge.

Les termes de brisure de la supersymétrie dans le secteur observable sont soumis à quelques contraintes. D’une part, les termes de brisure de la supersymétrie ne doivent pas introduire de divergences quadratiques qui engendreraient des corrections radiatives à la masse des bosons de Higgs et empêcheraient la résolution du problème de hiérarchie. Les termes de brisure de la supersymétrie ne générant pas de divergences quadratiques sont appelés termes de brisure douce de la supersymétrie ou termes doux (‘soft terms’).

Dans le cadre des modèles de supergravité aussi bien que des modèles $GMSB$, les termes de brisure de la supersymétrie dans le secteur observable peuvent être des termes de brisure douce de $SUSY$ générant des masses de particules supersymétriques inférieures au TeV .

En conclusion, si la nature est réellement supersymétrique, la supersymétrie doit être brisée spontanément dans un secteur caché et les termes de brisure de $SUSY$ dans le secteur observable doivent être des termes doux générant des masses de particules supersymétriques supérieures aux masses des particules du Modèle Standard et inférieures au TeV . Les modèles de supergravité ainsi que les modèles $GMSB$ permettent de réaliser un tel scénario de brisure de la supersymétrie. voir plus aux réf [100, 101].

D'un point de vue analytique

On a déjà vu que si on connaît la fonction d'onde de H_1 , on peut factoriser cet Hamiltonien et trouver un Hamiltonien SUSY-partenaire H_2 . Supposons maintenant que l'on connaisse le superpotentiel $W(x)$. Si, pour ce superpotentiel, ni H_1 ni H_2 n'ont une valeur propre nulle, la supersymétrie est dite brisée.

Définissons l'état fondamental par

$$|0\rangle = \psi_0(x) = \begin{pmatrix} \psi_0^{(1)}(x) \\ 0 \end{pmatrix}$$

si l'on considère que parmi H_1 et H_2 , seul H_1 peut avoir un niveau d'énergie nulle²

Pour que la supersymétrie ne soit pas brisée, il faut que [91].

$$Q|0\rangle = Q^+|0\rangle = 0|0\rangle \quad (1.50)$$

Si l'énergie de l'état fondamental de la matrice H définie en (1.24) est non nulle, alors la supersymétrie est brisée. Dans ce cas, les opérateurs A et A^\dagger ne changent plus le nombre de noeuds. Les relations entre les valeurs propres et les fonctions d'onde des Hamiltoniens H_1 et H_2 deviennent alors

$$E_n^{(2)} = E_n^{(1)}$$

$$\psi_n^{(2)} = \frac{A\psi_n^{(1)}}{\sqrt{E_{n+1}}}$$

$$\psi_n^{(1)} = \frac{A^\dagger\psi_n^{(2)}}{\sqrt{E_n^{(2)}}}$$

²Si seul H_2 peut avoir un niveau d'énergie nulle, on définit l'état fondamental par

$$|0\rangle = \psi_0(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_0^{(2)}(x) \end{pmatrix}$$

On voit donc que les relations entre les valeurs propres et fonctions propres de H_1 et H_2 dépendent du fait que la supersymétrie peut être brisée ou non.

$$|0\rangle = \psi_0(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_0^{(2)}(x) \end{pmatrix}$$

Si par contre on considère que les Hamiltoniens H_1 et H_2 peuvent tous deux avoir un état d'énergie nulle, l'état fondamental est défini par

$$|0\rangle = \psi_0(x) = \begin{pmatrix} \psi_0^{(1)}(x) \\ \psi_0^{(2)}(x) \end{pmatrix}$$

mais contrairement à (1.50), il suffit que $Q|0\rangle = 0|0\rangle$ ou que $Q^\dagger|0\rangle = 0|0\rangle$ pour que la supersymétrie ne soit pas brisée.

Indice de Witten

Witten a proposé un indice pour déterminer si la supersymétrie est brisée ou non. L'indice de Witten est défini par [102]

$$\Delta = n_1^{(E=0)} - n_2^{(E=0)}$$

c'est-à-dire la différence entre le nombre d'états d'énergie nulle pour les Hamiltoniens H_1 et H_2 . En effet, pour des énergies strictement positives, les niveaux d'énergie correspondant aux états propres de H_1 et de H_2 sont liés. Si $\Delta \neq 0$, on sait que la supersymétrie n'est pas brisée. Dans ce cas, on a soit $E_0^{(1)} = 0$, soit $E_0^{(2)} = 0$. Dans le schéma de la Figure (1-2) par exemple, la supersymétrie n'est pas brisée car $E_0^{(1)} = 0$.

Intuitivement, on aurait tendance à penser que si $\Delta = 0$, la supersymétrie est brisée. Ce n'est pas tout à fait le cas : il n'y a pas de brisure de supersymétrie si au moins une des énergies $E_0^{(1,2)}$ est nulle. Si $E_0^{(1)} = 0$, et $E_0^{(2)} = 0$, l'indice de Witten sera nul, et la supersymétrie ne sera pas brisée. un exemple illustrant ce fait est décrit en [92], rappelons que l'indice de Witten ne peut prendre que 3 valeurs :

$\Rightarrow 0$ si la supersymétrie est brisée (aucun des Hamiltoniens $H_{1,2}$ n'admet un état fondamental de niveau d'énergie zéro),

$\Rightarrow 0$ si la supersymétrie n'est pas brisée et si $E_0^{(1)}$ et $E_0^{(2)}$ sont nulles,

$\Rightarrow 1$ si la supersymétrie n'est pas brisée et si seul H_1 a un état fondamental normalisable de niveau d'énergie zéro,

$\Rightarrow -1$ si la supersymétrie n'est pas brisée et si seul H_2 a un état fondamental normalisable de niveau d'énergie zéro.

Superpotentiel et brisure de SUSY

Nous avons vu que quand H_1 et la fonction d'onde de l'état fondamental est connue nous pourrions factoriser l'hamiltonien et trouver un partenaire SUSY H_2 . Nous considèrent maintenant le problème inverse. Supposez que nous avons donné un superpotentiel $W(x)$. Dans ce cas-ci il y a deux possibilités; la fonction d'onde de l'état fondamental est celle pour H_1 (ou H_2) et peut être obtenu à partir :

$$\begin{aligned} A\psi_0^{(1)} = 0 & \quad \Rightarrow \quad \psi_0^{(1)} = N \exp\left(-\int^x W(y)dy\right), & (1.51) \\ A^\dagger\psi_0^{(2)} = 0 & \quad \Rightarrow \quad \psi_0^{(2)} = N \exp\left(+\int^x W(y)dy\right), \end{aligned}$$

Par convention, nous choisirons toujours W de telle manière que parmi H_1, H_2 seulement H_1 (le cas échéant) ait un état fondamental d'énergie nulle normalizable fonction propre. Ceci est assuré en choisissant W tels que $W(x)$ est positive (négative) pour un large x positive (negative). Ceci définit H_1 pour avoir le fermion numéro zéro dans le traitement précédent de SUSY.

S' il n'y a aucune solution normalizable de cette forme, alors H_1 n'a pas une valeur propre nulle et la SUSY est brisée. Maintenant soyons plus précis. Une symétrie de l'hamiltonien (ou

lagrangien) peut être spontanément brisée si la plus basse solution d'énergie ne respecte pas cette symétrie. Nous pouvons définir l'état fondamental dans notre système par un vecteur bidimensionnel de colonne :

$$|0\rangle = \psi_0(x) = \begin{bmatrix} \psi_0^{(1)}(x) \\ \psi_0^{(2)}(x) \end{bmatrix} \quad (1.52)$$

Pour que la SUSY ne soit pas brisée, exige

$$Q|0\rangle = Q^\dagger|0\rangle = 0|0\rangle$$

Ainsi nous avons immédiatement de l'éq. (1.27) que l'énergie de l'état fondamental doit être zéro dans ce cas-ci. Pour tout les cas que nous avons discuté précédemment, l'énergie de l'état fondamental était en effet zéro et par conséquent la fonction d'onde de l'état fondamental pour la matrice hamiltonienne peut être écrite

$$\psi_0(x) = \begin{bmatrix} \psi_0^{(1)}(x) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (1.53)$$

où $\psi_0^{(1)}(x)$ est donné par l'éq (1.51). Si nous considérons des superpotentials de la forme

$$W(x) = gx^n$$

alors pour n impair et g positive la fonction d'onde de l'état fondamental est toujours normalisable. Cependant pour le cas n pair et g arbitraire, alors il n'y a aucune fonction d'onde de l'état fondamental normalizable. En général quand on a un superpotential $W(x)$ de sorte que ni Q ni Q^\dagger n'annihile l'état fondamental comme par l'éq. (1.52) alors la SUSY est brisée et les potentiels V_1 et V_2 ont des énergies de l'état fondamental positives dégénérées.

Voyons une autre manière, si l'énergie de l'état fondamental de la matrice hamiltonienne n'est pas nulle alors la SUSY est brisée. Pour le cas de la SUSY brisée les opérateurs A et A^\dagger ne changent plus le nombre de noeuds et il y a un appariement 1-1 de tous les états propres de H_1 et de H_2 . Les relations précises qu'on obtient maintenant sont :

$$E_n^{(2)} = E_n^{(1)} \rangle 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.54)$$

$$\psi_n^{(2)} = \left[E_n^{(1)} \right]^{-1 \setminus 2} A \psi_n^{(1)} \quad (1.55)$$

$$\psi_n^{(1)} = \left[E_n^{(2)} \right]^{-1 \setminus 2} A^\dagger \psi_n^{(2)} \quad (1.56)$$

Sans oublier que la rupture de la SUSY peut être décrite par le nombre topologique de quantum l'index de Witten [103] que nous avons cité plus tôt. Cependant rappelons-nous cela, en général si le signe de $W(x)$ vis à vis du côté proche de l'infini est opposé (le contraire si il est négatif ou positif), alors la SUSY est non brisée, tandis que les autres cas elle est toujours brisée.

1.3 Conclusion

Points forts et points faibles des modèles supersymétriques

La supersymétrie a été introduite, entre autre, dans la but de résoudre les problèmes posés par le MS. Nous allons tirer un bilan des questions auxquelles répondent ou ne répondent pas les modèles standards et des nouvelles interrogations qu'ils génèrent.

Les points forts des modèles SUSY sont les suivants :

- la SUSY est la seule extension possible des symétrie de l'espace temps ;
- la gravité est automatiquement décrite quand la SUSY est rendue locale ;
- la SUSY est indispensable pour construire les théories des cordes et la M-théorie (modèles qui nécessitent des dimensions supplémentaires) ;
- l'introduction des superparticules permet d'annuler les divergences quadratiques des scalaires ;
- les constantes de couplage de l'interaction électromagnétique, faible et forte se rencontrent à une énergie commune, ce qui donne l'espoir d'unifier ces trois forces ;
- la brisure de la SUSY électrofaible trouve une explication naturelle ;
- la superparticule la plus légère est un très bon candidat pour la matière noire ;
- la SUSY permet d'expliquer l'asymétrie de baryons dans l'univers[104].

La SUSY a apporté des réponses, mais elle laisse encore quelques interrogations fondamentales en suspens. Par exemple, elle n'explique pas la masse très faible des neutinos, la disparité des couplages de Yukawa, la structure en famille, la symétrie structurelle entre quarks et leptons ou le choix du groupe de jauge. On peut également noter que la SUSY n'apporte pas de solution au problème du nombre de paramètre libre.

En plus de ses problèmes non résolus, la SUSY soulève des nouvelles difficultés. En voici un aperçu :

- la SUSY à basse énergie repose sur une particule à ce jour encore hypothétique : le boson de Higgs ;
- ce modèle ajoute un grand nombre de nouvelles particules dont aucune n'a encore été observé à ce jour ;
- le principe du mécanisme de la brisure de SUSY est très mal connu théoriquement ;
- la SUSY prévoit des changements de saveur en quantité trop importante [105].

Chapitre 2

Equation de Schrödinger dans un potentiel central

Trois objectifs dans ce chapitre, simplifier considérablement le problème de la recherche des fonctions propres et valeurs propres du hamiltonien d'une particule plongée dans un potentiel central, ne dépendant que de la distance r de la particule à l'origine, donner quelques notions qui peuvent nous aider dans les chapitres qui vont suivre.

2.1 Etats d'une particule dans un potentiel central

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

2.1.1 Hamiltonien

On considère une particule de masse m , se déplaçant dans un potentiel central $V(r)$, c'est à dire ne dépendant que de la distance r de la particule à un point O pris pour origine. Si \vec{P} est l'impulsion de la particule, \vec{r} le vecteur position, l'hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (2.1)$$

Nous nous proposons de trouver les valeurs propres et les fonctions propres de H , c'est à dire les solutions de

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.2)$$

Comme V ne dépend que de r (et non de θ et φ), il est préférable de travailler en coordonnées sphériques. L'expression du laplacien en coordonnées sphériques est :

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

Si l'on utilise l'expression du carré du moment cinétique orbital, \vec{L}^2 , en coordonnées sphériques,

$$\vec{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

On voit que laplacien peut se mettre sous la forme

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

et, finalement, l'équation aux valeurs propres de H s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (2.3)$$

Cette équation est identique à l'équation en coordonnées cartésiennes sauf en O , car les coordonnées sphériques ne permettent pas de décrire exactement ce qui se passe en O : l'expression du Laplacien Δ en coordonnées sphériques n'est pas définie en O . En conséquence, il faudra examiner la validité en O des solutions de l'éq(2.3).

Normalisation des solutions :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr = 1$$

2.1.2 Séparation des variables

L^2 et L_z n'agissent que sur θ et φ : ils commutent avec H . On va chercher des fonctions propres communes à H , L^2 et L_z (rappelons que $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$).

Elles sont de la forme :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} H\psi = E\psi \\ L^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi \\ L_z\psi = m\hbar\psi \end{array} \right\}$$

Les $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont normés

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta = 1$$

Il suffira donc de normaliser séparément $R(r)$.

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

pour un état lié.

En reportant ψ dans (2.3) , on obtient l'équation radiale :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] R_{kl}(r) = E_{kl} R_{kl}(r) \quad (2.4)$$

l est un paramètre de l'équation : E_{kl} et R_{kl} dépendent de ce paramètre.

- pour chaque valeur de l , il est possible que l'on ait plusieurs valeurs de E et R : c'est pourquoi on introduit un nouveau nombre quantique k .

- pour chaque valeur E_{kl} de l'énergie, il y aura au moins $(2l+1)$ états propres correspondants aux diverses valeurs possibles de m c'est *la dégénérescence essentielle*.

Cela vient du fait que, $V(r)$ ayant la symétrie sphérique, l'orientation du moment cinétique n'intervient pas.

L'opérateur différentiel ne dépend pas de m : donc, le nombre quantique m n'a pas besoin d'être en indice de R_{kl} .

2.1.3 Changement de fonction

Il est commode de poser

$$rR_{kl}(r) = U_{kl}(r) \quad (2.5)$$

En multipliant à gauche les deux membres de l'éq(2.4) par r il vient alors pour l'équation radiale

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] U_{kl}(r) = E_{kl} U_{kl}(r) \quad (2.6)$$

équation identique à celle d'une particule se déplaçant dans un espace à une dimension, et soumise pour $r < 0$ à un potentiel infini, et pour $r > 0$ au potentiel effectif :

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

- $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$ est le potentiel centrifuge (la force tend à éloigner la particule du centre de force O).

- Ce potentiel est nul pour $l = 0$ la particule pourra alors venir en O : on conçoit que $R_{kl}(r) \neq 0$ pour $r = 0$

- Si $l \neq 0$ ce potentiel tend vers l'infini, quand r tend vers zéro :

$$V_{eff}(r) \rightarrow \infty \quad \text{quand} \quad r \rightarrow 0$$

et empêche la particule de venir en O. On conçoit que :

$$R(r) = 0 \quad \text{pour} \quad r = 0 \quad \text{si} \quad l \neq 0$$

Conditions imposées sur $R_{kl}(r)$ et $U_{kl}(r)$

La fonction d'onde $\psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = R_{kl}(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$ ayant un sens physique, est bornée pour toute valeur de r . En particulier $R_l(0)$ est fini. Comme d'après (2.5), on en déduit

$$U_l(0) = 0$$

La norme de $\psi_{klm}(r, \theta, \varphi)$ est donnée par la relation

$$I = \int |\psi_{klm}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega = \int r^2 dr |R_{kl}(r)|^2 \int d\Omega |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2$$

$Y_l^m(\theta, \varphi)$ étant normée, l'intégrale en Ω vaut 1, de sorte que :

$$\int_0^\infty |R_{kl}(r)|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |U_{kl}(r)|^2 = 1 \quad (2.7)$$

pour un état lié

2.1.4 Comportement à l'origine

L'équation (2.6) est une équation différentielle du second ordre, elle admet 2 solutions générales.

Celles-ci ne sont pas toutes les deux solutions de (2.2) car (2.6) n'est pas identique à (2.2) en zéro.

Supposons que $V(r)$ ne tende pas vers l'infini plus rapidement que $\frac{1}{r}$ quand $r \rightarrow 0$ (C'est le cas le plus fréquent en physique, en particulier pour l'atome d'hydrogène H).

Supposons que, lorsque $r \rightarrow 0$, $U(r)$ varie comme r^s et gardons dans l'équation (2.6) les termes de plus bas degré en r , c'est-à-dire en r^{s-2} , il vient :

$$-s(s-1) + l(l+1) = 0, \quad \text{car} \quad U(r) = r^s \sum_0^\infty a_n r^n$$

$$\left\{ \begin{array}{l} s = l + 1 \rightarrow U(r) \approx r^{l+1} \\ s = -l \rightarrow U(r) \approx \frac{1}{r^l} \end{array} \right\}$$

seul $s = l + 1$ convient , $s = -l$ ne convient pas

car $U(r)$ doit être de carré sommable.

En effet, pour une fonction telle que $l = 0$, $U(r) \approx 1$ et $R(r) \approx \frac{1}{r}$ on aurait :

$$\Delta R = -4\pi\delta(\vec{r})$$

(où $\delta(\vec{r})$ est la distribution de Dirac) et $R(r)$ serait solution de :

$$(H - E) R = -\frac{\hbar^2}{2m} (-4\pi\delta(\vec{r}))$$

et non pas solution de (2.2) :

$$(H - E)\psi = 0$$

Si $R \approx \frac{1}{r}$ le Laplacien d'une telle fonction est proportionnel à la "distribution" de Dirac à l'origine, et est nul partout ailleurs.

Si $l \neq 0 \rightarrow U(r) \approx \frac{1}{r^l}$

Il faut donc $s \geq 1$ et seuls $s = l + 1$ convient. Ceci entraîne que $U(r) \rightarrow 0$ quand $r \rightarrow 0$.

Donc l'équation (2.6) est équivalente à (2.2) si on lui garde la condition :

$$U(r) \rightarrow 0 \quad \text{quand} \quad r \rightarrow 0$$

Chapitre 3

Détermination des énergies et des états au moyen de la MQSUSY

3.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons proposer un potentiel du type $V(r) = ar^2 + br^{-4} + cr^{-6}$, ($a > 0, c > 0$) dont les énergies et les fonctions d'onde sont disponibles comme référence par d'autres méthodes d'investigation. Ce potentiel a été le sujet de plusieurs travaux [106] - [113], mais nos références de résultats seront exclusivement [114] et [115].

Nous allons maintenant introduire ce potentiel dans l'équation radiale de Schrödinger (2.4) qui comme nous l'avons déjà prédit à la même forme que l'équation de Schrödinger unidimensionnelle. Ainsi nous pouvons essayer d'introduire les notions de la MQSUSY à ce système.

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

$$U(r) = U_0(r)U_\infty(r)U_{susy}(r) \quad (3.1)$$

où $U_0(r)$ est la solution au comportement à l'origine ($r \rightarrow 0$), $U_\infty(r)$ est la solution au comportement asymptotique ($r \rightarrow \infty$) et $U_{susy}(r)$ la fonction inconnue que nous allons trouver par la méthode SUSY. Cette solution est liée aux paramètres a , b , et c du potentiel.

3.2 Etude analytique

On injecte l'expression du potentiel $V(r)$ dans l'équation (2.4), il vient :

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (ar^2 + br^{-4} + cr^{-6} - E) \right) U(r) = 0 \quad (3.2)$$

La nécessité de prendre les unités : $2m = \hbar = 1$ n'est qu'un choix de convenance pour permettre une facile comparaison avec les résultats de Y. P. Varshni [114] et nos résultat en [115].

On pose : $\lambda = E$ et $\alpha^2 = a$

L'équation différentielle devient :

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \alpha^2 r^2 + br^{-4} + cr^{-6} - \lambda \right) U(r) = 0$$

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

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} + x^2 + b\alpha x^{-4} + c\alpha^2 x^{-6} - \frac{\lambda}{\alpha} \right) U(x) = 0$$

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

L'équation se réduit et on a :

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

La solution de cette équation :

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

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

$$U_0(x) \propto \exp - \left(\frac{\beta}{x^2} \right)$$

La solution générale se met sous la forme

$$U(x) = \left[\exp - \left(\frac{x^2}{2} \right) \right] \left[\exp - \left(\frac{\beta}{x^2} \right) \right] U_s(x)$$

où β , est une paramètrs .

On pose : $l = 0$ et $\alpha = \sqrt{a} = 1 \rightarrow x = r$, on aura alors :

$$U(r) = \left(\exp - \left(\frac{r^4 + 2\beta}{2r^2} \right) \right) U_{SUSY} \quad (3.3)$$

L'expression (3.2), sera :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + (E - r^2 - br^{-4} - cr^{-6}) \right) U(r) = 0 \quad (3.4)$$

On pose

$$-\frac{d^2}{dr^2}U(r) = (E - V(r))U(r) \quad (3.5)$$

Nous pouvons proposer selon la MQ SUSY l'hamiltonien H_1

$$H_1U(r) = \left(A_1^+ A_1 + E_0^{(1)} \right) U(r) = \left(-\frac{d^2}{dr^2} + V_1 \right) U(r) \quad (3.6)$$

$$H_1 = A_1^+ A_1 + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dr^2} + V_1(r) \quad (3.7)$$

On peut écrire le potentiel sous la forme

$$V_1(r) = W_1^2(r) - W_1'(r) \quad (3.8)$$

de l'éq (3.4) et (3.7) on peut déduire

$$V_1(r) = r^2 + br^{-4} + cr^{-6} - E_0^{(1)}$$

on propose le superpotentiel $W_1(r)$ sous la forme

$$W_1(r) = Ar + \frac{B}{r} + \frac{C}{r^2} + \frac{D}{r^3}, \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} V_1(r) &= (2AB - A) r^0 + A^2 r^2 + 2A \frac{C}{r} + (B^2 + 2AD + B) \frac{1}{r^2} + (2BC + 2C) \frac{1}{r^3} \\ &\quad + (C^2 + 3D + 2BD) \frac{1}{r^4} + 2 \frac{C}{r^5} D + \frac{1}{r^6} D^2 \\ &= r^2 + br^{-4} + cr^{-6} - E_0^{(1)} \end{aligned}$$

Les relations entre les paramètres de cette équation satisfont les définitions de la SUSY

$$\left\{ \begin{array}{l} A = \pm 1 \\ B = \frac{1}{2D} (b - 3D) \\ D = \pm \sqrt{c} \\ C = 0 \\ A(2B - 1) = -E_0^{(1)} \\ (B^2 + 2AD + B) = 0 \end{array} \right.$$

En étudiant ces relations nous allons avoir plusieurs cas selon le signe de A et D , et la détermination de ces valeurs sera en fonction du comportement à l'origine et asymptotique de la fonction d'onde donc le cas qui nous intéresse sera en définitif

$$A = +1 \text{ et } D = -\sqrt{c}$$

Les relations précédentes seront

$$A = +1 \tag{3.10a}$$

$$B = -\frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 3\sqrt{c}) \tag{3.10b}$$

$$C = 0 \tag{3.10c}$$

$$D = -\sqrt{c} \tag{3.10d}$$

$$E_0^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{c}} (b + 4\sqrt{c}) \tag{3.10e}$$

La contrainte entre b et c sera

$$\left(3c + 4b\sqrt{c} + b^2 - 8c^{\frac{3}{2}} \right) = 0 \tag{3.11}$$

alors on peut écrire le superpotentiel comme

$$W_1(r) = r - \frac{\left(\frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 3\sqrt{c}) \right)}{r} - \frac{\sqrt{c}}{r^3}$$

et suivant la relation (1.29) le potentiel admet une solution exacte

$$U_0^{(1)}(r) = N_0^{(1)} \exp \left(- \int^r \left(r - \frac{\left(\frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 3\sqrt{c}) \right)}{r} - \frac{\sqrt{c}}{r^3} \right) dr \right) \quad (3.12)$$

après intégration

$$\begin{aligned} U_0^{(1)}(r) &= N_0^{(1)} \left(\exp - \left(\frac{r^4 + \sqrt{c}}{2r^2} \right) \right) r^{\left(\frac{1}{2} \frac{b}{\sqrt{c}} + \frac{3}{2} \right)} \\ &= \left(\exp - \left(\frac{r^4 + 2\beta}{2r^2} \right) \right) U_{susy}(r) \end{aligned} \quad (3.13)$$

où $N_0^{(1)}$ est une constante de normalisation.

Nous pouvons à présent calculer les valeurs des énergies suivant l'éq (3.10e) et présenter les fonctions d'onde correspondantes à ces énergies, n'oublions pas que les valeurs de b et c obéissent à la contrainte (3.11). Le tableau (III.1) illustre ce qui précède.

Tableau (III.1)

c	b	$E_0^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{c}} (b + 4\sqrt{c})$
1	1	5.0
1	-5	-1
2	2.134 2	5.509 1
2	-7.791	-1.509 1
10	9.892 1	7.128 2
10	-22.541	-3.128 1
100	70	11.0
100	-110	-7.0

Nous allons prendre en considération que les valeurs positives des énergies, (MQSUSY),

Exemple 1.1 : La fonction d'onde radiale $U_0^{(1)}(r)$ relative au cas $E_0^{(1)} = 5$

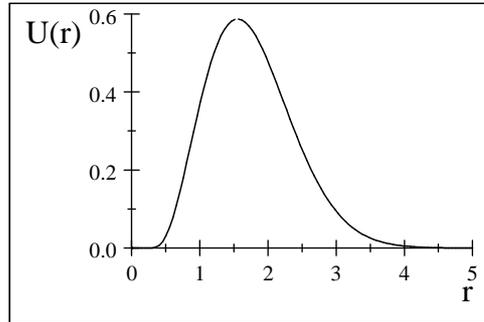


Fig (3-1) : La fonction d'onde non normalisée $U_0^{(1)}(r)$

Exemple 1.2 : La fonction d'onde radiale $U_0^{(1)}(r)$ relative au cas $E_0^{(1)} = 5.5091$

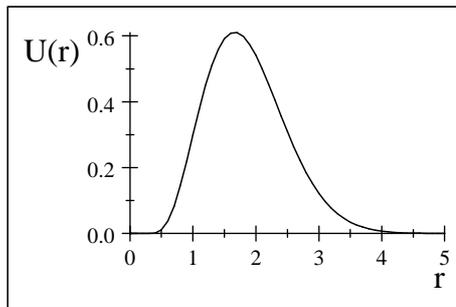


Fig (3-2) : La fonction d'onde non normalisée $U_0^{(1)}(r)$

Exemple 1.3 : La fonction d'onde radiale $U_0^{(1)}(r)$ relative au cas $E_0^{(1)} = 7.1282$

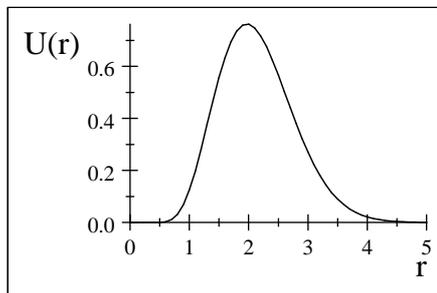


Fig (3-3) : La fonction d'onde non normalisée $U_0^{(1)}(r)$

Conclusion :

Les courbes $U_0^{(1)}(r)$ ne présentent aucun nœuds, donc elles correspondent à l'état fondamental, d'énergie $E_0^{(1)}$. On peut déjà conclure que pour $n = 0$ et $l = 0$, la fonction d'onde radiale décrit seulement l'état fondamental.

La deuxième étape dans La MQ SUSY est de trouver les partenaires supersymétriques de H_1 et V_1 , H_2 , et V_2 et donc W_2 . Dans cette seconde approche, on va commencer par enlever l'état fondamental $U_0^{(1)}$ d'énergie $E_0^{(1)}$ pour le potentiel $V_1(r)$, afin de générer le potentiel SUSY-partenaire $V_2(r)$. En combinant l'éq (1.30) et (1.31), on trouve

$$H_2 = A_1 A_1^+ + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dr^2} + V_2(r)$$

où

$$V_2(r) = W_1^2 + W_1' + E_0^{(1)} = V_1(r) + 2W_1' = V_1(r) - 2\frac{d^2}{dr^2} \ln U_0^{(1)}$$

qui a les mêmes valeurs propres que V_1 , sauf en ce qui concerne l'état lié d'énergie $E_0^{(1)}$.

Et en même temps on propose un nouveau superpotentiel qui va déterminer V_2

$$V_2 = W_2^2 - W_2' + E_0^{(2)} \tag{3.14}$$

on trouve

$$V_2(r) = V_1(r) + 2W_1' = r^2 + \frac{1}{\sqrt{c}r^2} (b + 3\sqrt{c}) + \frac{(b + 6\sqrt{c})}{r^4} + \frac{c}{r^6} + \left(2 - \frac{1}{\sqrt{c}} (b + 4\sqrt{c})\right)$$

on propose

$$W_2 = A_2 r + \frac{B_2}{r} + \frac{C_2}{r^2} + \frac{D_2}{r^3}$$

et de la même manière que W_1 on arrive aux relations suivantes :

$$A_2 = 1 \quad (3.15a)$$

$$B_2 = -\frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 9\sqrt{c}) \quad (3.15b)$$

$$C_2 = 0 \quad (3.15c)$$

$$D_2 = -\sqrt{c} \quad (3.15d)$$

$$E_1^{(1)} = \frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 19\sqrt{c}) \quad (3.15e)$$

$$3\frac{b}{\sqrt{c}} + \frac{1}{4}\frac{b^2}{c} - 2\sqrt{c} + \frac{51}{4} = 0 \quad (3.16)$$

donc,

$$W_2(r) = r - \frac{\frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 9\sqrt{c})}{r} - \frac{\sqrt{c}}{r^3} \quad (3.17)$$

et,

$$\begin{aligned} U_0^{(2)}(r) &= N_0^{(2)} \exp \left(- \int^r \left(r - \frac{\frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 9\sqrt{c})}{r} - \frac{\sqrt{c}}{r^3} \right) dr \right) \\ &= N_0^{(2)} \exp \left(- \left(\frac{r^4 + \sqrt{c}}{2r^2} \right) \right) r^{\left(\frac{1}{2} \frac{b}{\sqrt{c}} + \frac{9}{2} \right)} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Le tableau (III.2) contient quelques résultats de $E_0^{(2)}$, sans oublier la relation suivante

$$E_0^{(2)} = E_1^{(1)} \quad (3.19)$$

Tableau (III.2)

c	b	$E_0^{(2)} = E_1^{(1)} = \frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 19\sqrt{c})$
10	-8.8256	8.1046
10	-29.122	4.8954
100	20.623	10.531
100	-140.62	2.469
200	55.245	11.453
200	-224.95	1.5468
1000	298.10	14.213
1000	-677.57	-1.2133
2000	559.65	15.757
2000	-1096.3	-2.757
3000	798.11	16.786
3000	-1455.4	-3.7859

Exemple 2.1 : La fonction d'onde radiale $U_0^{(2)}(r)$ relative au cas $E_0^{(2)} = 8.1046$

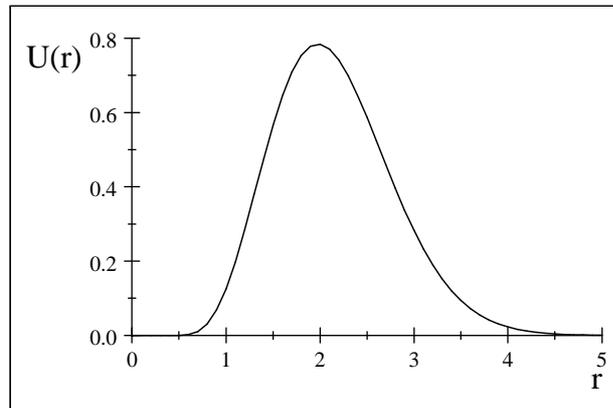


Fig (3-4) : La fonction d'onde non normalisée $U_0^{(2)}(r)$

Exemple 2.2 : La fonction d'onde radiale $U_0^{(2)}(r)$ relative au cas $E_0^{(2)} = 10.531$

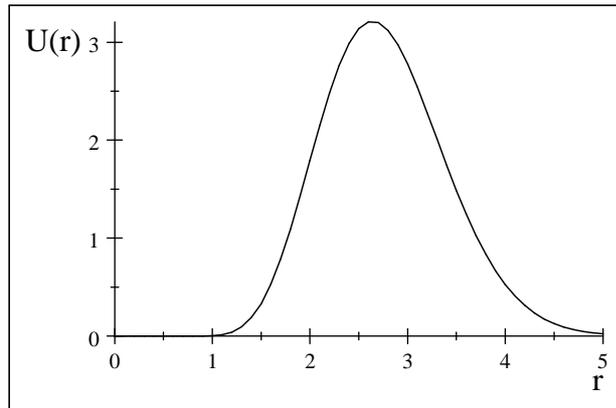


Fig (3-5) : La fonction d'onde non normalisée $U_0^{(2)}(r)$

Exemple 2.3 : La fonction d'onde radiale $U_0^{(2)}(r)$ relative au cas $E_0^{(2)} = 15.757$

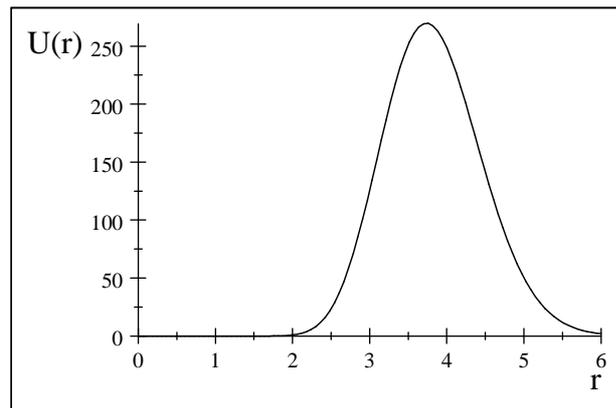


Fig (3-6) : La fonction d'onde non normalisée $U_0^{(2)}(r)$

Conclusion :

Les courbes $U_0^{(2)}(r)$ ne présentent aucun nœuds, donc elles correspondent à l'état fondamental, d'énergie $E_0^{(2)}$. On peut conclure cette fois aussi que pour $n = 0$ et $l = 0$, la fonction d'onde radiale décrit seulement l'état fondamental, n'oubliant pas qu'on parle du partenaire SUSY H_2 .

Il ne faut pas nous éloigner de nôtre but, qui est de trouver la hiérarchie de H_1 , pour chaque $n = 0.1.2.3\dots$

Nous avons déjà trouvé $E_1^{(1)} = E_0^{(2)}$ il r ste   trouver la fonction d'onde correspondante $U_1^{(1)}$. Selon l' q (1.32)

$$E_{n+1}^{(1)} = E_n^{(2)} \quad , \quad U_n^{(2)} = \left(E_{n+1}^{(1)} - E_0^{(1)} \right)^{-1/2} A_1 U_{n+1}^{(1)}$$

et

$$U_{n+1}^{(1)} = \left(E_n^{(2)} - E_0^{(1)} \right)^{-1/2} A_1^+ U_n^{(2)} \quad (3.20)$$

$$n = 0, \quad U_1^{(1)} = \left(E_0^{(2)} - E_0^{(1)} \right)^{-1/2} A_1^+ U_0^{(2)} \quad (3.21a)$$

$$U_1^{(1)} = \left(E_0^{(2)} - E_0^{(1)} \right)^{-1/2} \left(-\frac{d}{dr} + W_1(r) \right) U_0^{(2)} \quad (3.21b)$$

En rempla ant tout les termes par leurs  quations correspondantes, on trouve en alors

$$U_1^{(1)}(r) = -N_0^{(2)} \frac{1}{\sqrt{7c}} r^{\frac{1}{2\sqrt{c}}(b+3\sqrt{c})} (2c + br^2 + 6\sqrt{c}r^2 - 2\sqrt{c}r^4) \exp \left(- \left(\frac{r^4 + \sqrt{c}}{2r^2} \right) \right) \quad (3.22)$$

o  $N_0^{(2)}$ est une constante de normalisation

Exemple 2.4 : La fonction d'onde radiale $U_1^{(1)}(r)$ relative au cas $E_1^{(1)} = 8.1046$

$$\begin{aligned}
 U_1^{(1)}(r) = & 0.755\,93r^{\frac{513\,068\,764\,265\,112\,196\,047}{125\,000\,000\,000\,000\,000\,000}} \exp\left(-\frac{0.5}{r^2}(r^4 + 3.162\,3)\right) \\
 & -1.212\,9r^{\frac{263\,068\,764\,265\,112\,196\,047}{125\,000\,000\,000\,000\,000\,000}} \exp\left(-\frac{0.5}{r^2}(r^4 + 3.162\,3)\right) \\
 & -2.390\,5r^{\frac{13\,068\,764\,265\,112\,196\,047}{125\,000\,000\,000\,000\,000\,000}} \exp\left(-\frac{0.5}{r^2}(r^4 + 3.162\,3)\right)
 \end{aligned}$$

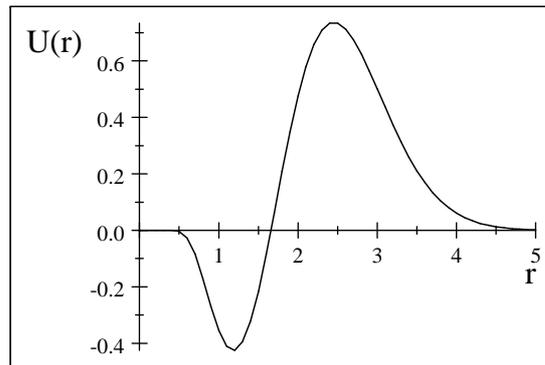


Fig (3-7) : La fonction d'onde non normalisée $U_1^{(1)}(r)$

Exemple 2.5 : La fonction d'onde radiale $U_1^{(1)}(r)$ relative au cas $E_1^{(1)} = 10.531$

$$U_1^{(1)} = -r^{\frac{50\,623}{20\,000}} \exp\left(-\frac{1}{2r^2}(r^4 + 10)\right) (-0.755\,93r^4 + 3.047\,3r^2 + 7.559\,3)$$

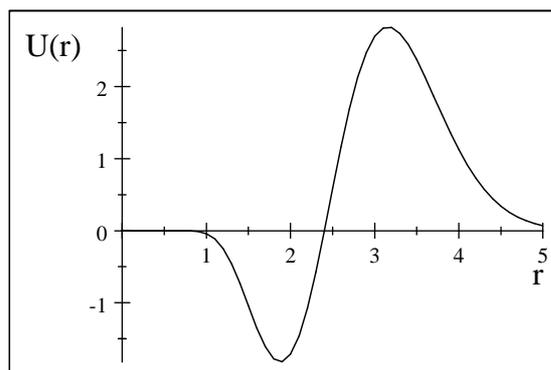


Fig (3-8) : La fonction d'onde non normalisée $U_1^{(1)}(r)$

Exemple 2.6 : La fonction d'onde radiale $U_1^{(1)}(r)$ relative au cas $E_1^{(1)} = 14.213$

$$U_1^{(1)} = 0.75593r^{\frac{102133748524809693943}{1000000000000000000}} \exp\left(-\frac{0.5}{r^2}(r^4 + 31.623)\right) - 23.905r^{\frac{310668742624048469717}{500000000000000000}} \exp\left(-\frac{0.5}{r^2}(r^4 + 31.623)\right) - 5.8308r^{\frac{410668742624048469717}{500000000000000000}} \exp\left(-\frac{0.5}{r^2}(r^4 + 31.623)\right)$$

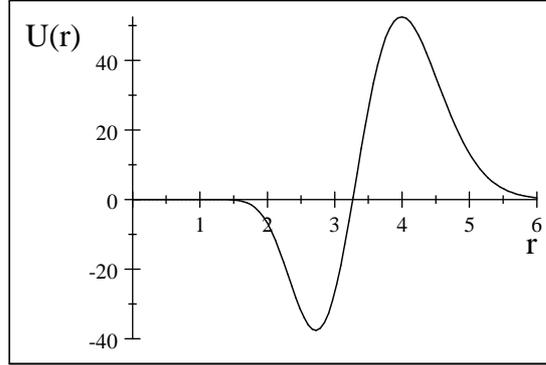


Fig (3-9) : La fonction d'onde non normalisée $U_1^{(1)}(r)$

Conclusion :

Les $U_1^{(1)}(r)$ présentent un nœud, donc elles correspondent au premier état excité, d'énergie $E_1^{(1)}$. Alors pour $n = 1$ et $l = 0$, la fonction d'onde radiale décrit le premier état excité.

Maintenant on peut dès lors aussi refactoriser H_2 pour déterminer son partenaire SUSY H_3 , comme dans l'éq (1.35 et 1.36)

$$H_2 = A_2 A_2^+ + E_1^{(1)} = -\frac{d^2}{dr^2} + V_3(r) \quad (3.23a)$$

$$V_3 = V_1 - 2\frac{d^2}{dr^2} \ln(U_0^1 U_0^2) \quad (3.23b)$$

$$\text{et en même temps} \quad (3.23c)$$

$$V_3 = W_3^2 - W_3' + E_0^3 \quad (3.23d)$$

où le superpotentiel est proposé comme

$$W_3 = A_3 r + \frac{B_3}{r} + \frac{C_3}{r^2} + \frac{D_3}{r^3} \quad (3.24)$$

Après une manipulation mathématique, on trouve ;

$$A_3 = 1 \quad (3.25a)$$

$$B_3 = -\frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 15\sqrt{c}) \quad (3.25b)$$

$$C_3 = 0 \quad (3.25c)$$

$$D_3 = -\sqrt{c} \quad (3.25d)$$

$$E_0^3 = \frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 35\sqrt{c}) \quad (3.25e)$$

$$147c + 20b\sqrt{c} + b^2 - 8c^{\frac{3}{2}} = 0 \quad (3.26)$$

donc,

$$W_3(r) = r - \frac{\frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 15\sqrt{c})}{r} - \frac{\sqrt{c}}{r^3} \quad (3.27)$$

n'oublions pas que

$$E_0^{(3)} = E_1^{(2)} = E_2^{(1)} \quad (3.28)$$

De la même manière on illustre le tableau suivant

Tableau (III.3)

c	b	$E_0^{(3)} = \frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 35\sqrt{c})$
100	-42.554	15.372
100	-157.45	9.6275
200	-26.411	16.566
200	-256.43	8.4338
1000	137.62	19.676
1000	-770.08	5.3240
2000	341.16	21.314
2000	-1235.6	3.6856

La détermination de la fonction d'onde $U_0^{(3)}$ est telle que

$$U_0^{(3)}(r) = N_0^{(3)} \exp \left(- \int^r \left(r - \frac{\frac{1}{2\sqrt{c}} (b + 15\sqrt{c})}{r} - \frac{\sqrt{c}}{r^3} \right) dr \right) \quad (3.29a)$$

$$= N_0^{(3)} \exp \left(- \left(\frac{r^4 + \sqrt{c}}{2r^2} \right) \right) r^{\left(\frac{1}{2} \frac{b}{\sqrt{c}} + \frac{15}{2} \right)} \quad (3.29b)$$

toujours $N_0^{(3)}$ est une constante de normalisation

Exemple 3.1 : La fonction d'onde radiale $U_0^{(3)}(r)$ relative au cas $E_0^{(3)} = 15.372$

$$U_0^{(3)}(r) = \exp \left(- \left(\frac{r^4 + \sqrt{100}}{2r^2} \right) \right) r^{\left(\frac{1}{2} \frac{-42.554}{\sqrt{100}} + \frac{15}{2} \right)}$$

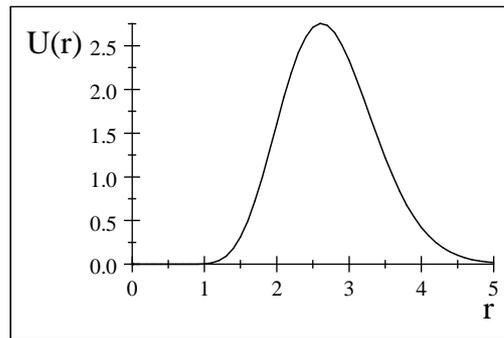


Fig (3-10) : La fonction d'onde non normalisée $U_0^{(3)}(r)$

Exemple 3.2 : La fonction d'onde radiale $U_0^{(3)}(r)$ relative au cas $E_0^{(3)} = 16.566$

$$U_0^{(3)}(r) = \exp\left(-\left(\frac{r^4 + \sqrt{200}}{2r^2}\right)\right) r^{\left(\frac{1}{2}\left(\frac{-26.411}{\sqrt{200}}\right) + \frac{15}{2}\right)}$$

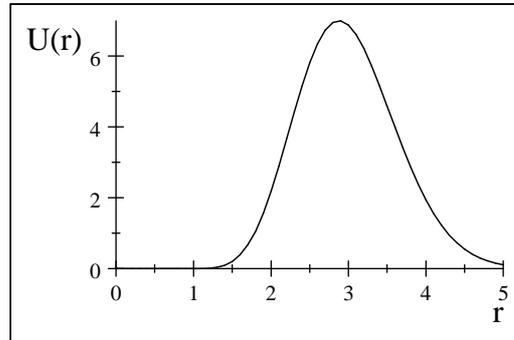


Fig (3-11) : La fonction d'onde non normalisée $U_0^{(3)}(r)$

Exemple 3.3 : La fonction d'onde radiale $U_0^{(3)}(r)$ relative au cas $E_0^{(3)} = 21.314$

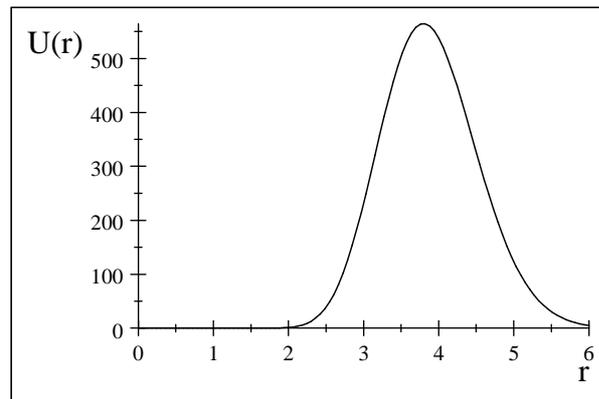


Fig (3-12) : La fonction d'onde non normalisée $U_0^{(3)}(r)$

Conclusion :

Les courbes $U_0^{(3)}(r)$ correspondent à l'état fondamental, d'énergie $E_0^{(3)}$. On peut conclure cette fois aussi que pour $n = 0$ et $l = 0$, la fonction d'onde radiale décrit seulement l'état fondamental, n'oubliant pas qu'on parle du partenaire SUSY H_3 .

A présent il faut revenir à H_2 puis H_1 , ceci bien sùre pour calculer les fonctions d'onde $U_1^{(2)}$ puis $U_2^{(1)}$. Souvenons nous de l'éq (1.32)

$$\begin{aligned} U_n^{(3)}(r) &= \left(E_{n+1}^{(2)} - E_0^{(2)}\right)^{-1\setminus 2} A_2 U_{n+1}^{(2)} \\ n &= 0, \quad U_0^{(3)} = \left(E_1^{(2)} - E_0^{(2)}\right)^{-1\setminus 2} A_2 U_1^{(2)} \end{aligned}$$

et

$$U_{n+1}^{(2)} = \left(E_n^{(3)} - E_0^{(2)}\right)^{-1\setminus 2} A_2^+ U_n^{(3)} \quad (3.30)$$

donc

$$n = 0, \quad U_1^{(2)} = \left(E_0^{(3)} - E_0^{(2)}\right)^{-1\setminus 2} A_2^+ U_0^{(3)} \quad (3.31a)$$

$$U_1^{(2)} = \left(E_0^{(3)} - E_0^{(2)}\right)^{-1\setminus 2} \left(-\frac{d}{dr} + W_2(r)\right) U_0^{(3)} \quad (3.31b)$$

ceci est pour trouver le 2ème état excité $U_2^{(1)}$ car

$$U_n^{(3)} = \left(E_{n+2}^{(1)} - E_1^{(1)}\right)^{-1\setminus 2} \left(E_{n+2}^{(1)} - E_0^{(1)}\right)^{-1\setminus 2} A_2 A_1 U_{n+2}^{(1)} \quad (3.32a)$$

$$U_{n+2}^{(1)} = \left(E_n^{(3)} - E_1^{(1)}\right)^{-1\setminus 2} \left(E_n^{(3)} - E_0^{(1)}\right)^{-1\setminus 2} A_2^+ A_1^+ U_n^{(2)} \quad (3.32b)$$

$$\text{pour } n = 0 \quad U_2^{(1)} = \left(E_0^{(3)} - E_1^{(1)}\right)^{-1\setminus 2} \left(E_0^{(3)} - E_0^{(1)}\right)^{-1\setminus 2} A_2^+ A_1^+ U_1^{(2)} \quad (3.32c)$$

On trouve alors l'équation qui décrit la fonction d'onde $U_1^{(2)}(r)$

$$U_1^{(2)}(r) = -\frac{1}{2\sqrt{2c}} r^{\frac{1}{2\sqrt{c}}(b+9\sqrt{c})} (2c + br^2 + 12\sqrt{c}r^2 - 2\sqrt{c}r^4) \exp\left(-\frac{1}{2r^2}(r^4 + \sqrt{c})\right) \quad (3.33)$$

Exemple 3.4 : La fonction d'onde radiale $U_1^{(2)}(r)$ relative au cas $E_1^{(2)} = 15.372$

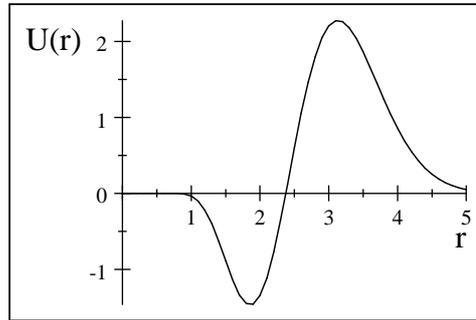


Fig (3-13) : La fonction d'onde non normalisée $U_1^{(2)}(r)$

Exemple 3.5 : La fonction d'onde radiale $U_1^{(2)}(r)$ relative au cas $E_1^{(2)} = 16.566$

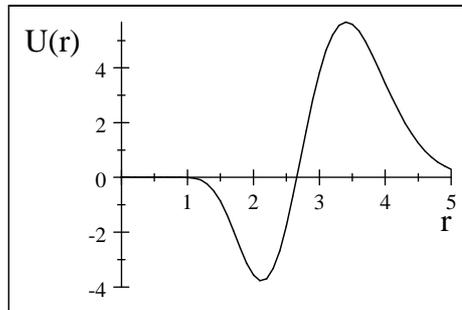


Fig (3-14) : La fonction d'onde non normalisée $U_1^{(2)}(r)$

Exemple 3.6 : La fonction d'onde radiale $U_0^{(3)}(r)$ relative au cas $E_0^{(3)} = 21.314$

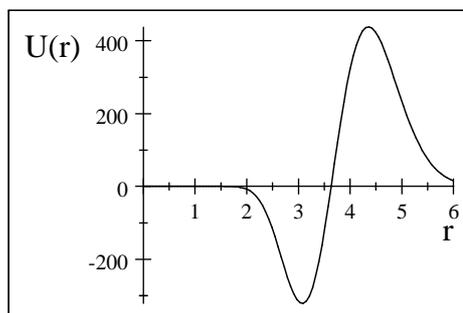


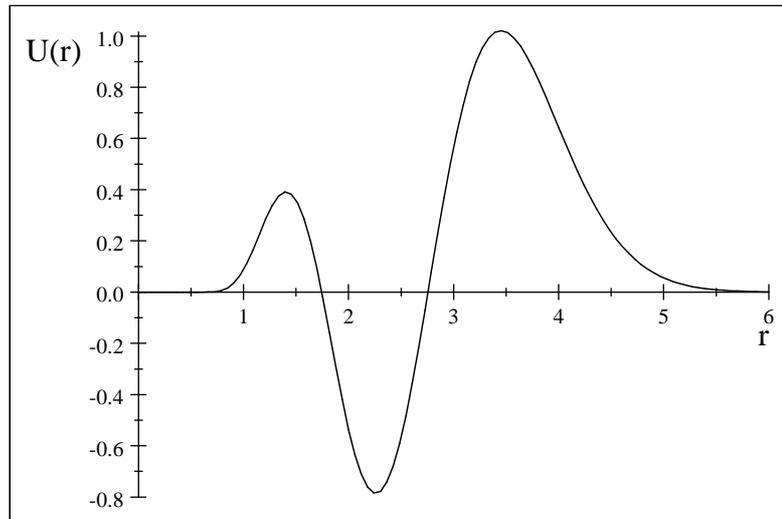
Fig (3-15) : La fonction d'onde non normalisée $U_1^{(2)}(r)$

Conclusion :

Les courbes $U_1^{(2)}(r)$ présentent le premier état excité, d'énergie $E_1^{(2)} = E_0^{(3)}$. On applique l'éq (3.32c) pour trouver la fonction d'onde $U_2^{(1)}(r)$, et on arrive à,

$$U_2^{(1)}(r) = \frac{1}{120} \frac{\sqrt{30}}{c} r^{\frac{1}{2\sqrt{c}}} (b+3\sqrt{c}) \exp\left(-\frac{1}{2r^2} (r^4 + \sqrt{c})\right) \begin{pmatrix} 108cr^4 - 46cr^6 + 4cr^8 + b^2r^4 \\ +30c^{\frac{3}{2}}r^2 - 8c^{\frac{3}{2}}r^4 \\ +4c^2 + 4bcr^2 \\ +19b\sqrt{c}r^4 - 4b\sqrt{c}r^6 \end{pmatrix}$$

Exemple 3.7 : La fonction d'onde radiale $U_2^{(1)}(r)$ relative au cas $E_2^{(1)} = 15.372$



(Fig 3-16) : La fonction d'onde non normalisée $U_2^{(1)}(r)$

Exemple 3.8 : La fonction d'onde radiale $U_2^{(1)}(r)$ relative au cas $E_2^{(1)} = 16.566$

$$U_2^{(1)}(r) = \frac{1}{120} \frac{\sqrt{30}}{((200))} r^{\frac{1}{2\sqrt{(200)}}} (-26.411 + 3\sqrt{(200)}) \exp\left(-\frac{1}{2r^2} (r^4 + \sqrt{(200)})\right) \left(\begin{array}{l} 108((200))r^4 - 46(200)r^6 + 4((200))r^8 + -26.411^2 r^4 + 30((200))^{\frac{3}{2}} r^2 \\ -8((200))^{\frac{3}{2}} r^4 + 4(200)^2 + 4(-26.411)((200))r^2 \\ +19(-26.411)\sqrt{(200)}r^4 - 4(-26.411)\sqrt{(200)}r^6 \end{array} \right)$$

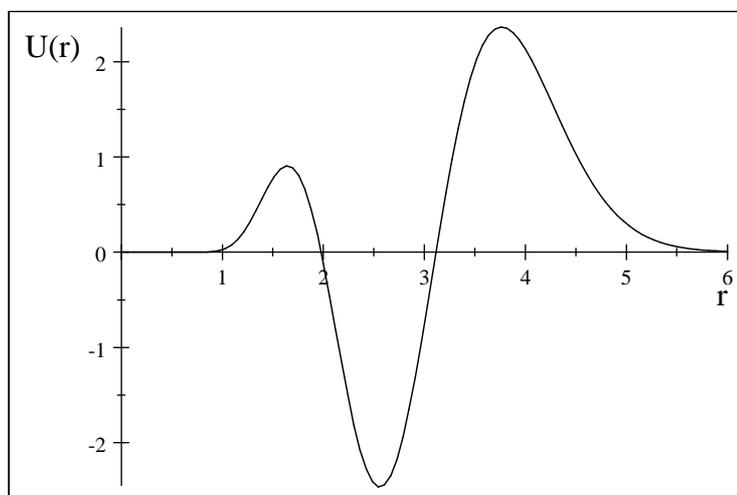


Fig (3-17) : La fonction d'onde non normalisée $U_2^{(1)}(r)$

Exemple 3.9 : La fonction d'onde radiale $U_2^{(1)}(r)$ relative au cas $E_2^{(1)} = 21.314$

$$U_2^{(1)}(r) = \frac{1}{120} \frac{\sqrt{30}}{((2000))} r^{\frac{1}{2\sqrt{(2000)}}} (341.16 + 3\sqrt{(2000)}) \exp\left(-\frac{1}{2r^2} (r^4 + \sqrt{(2000)})\right) \left(\begin{array}{l} 108((2000))r^4 - 46(2000)r^6 + 4((2000))r^8 \\ +341.16^2 r^4 + 30((2000))^{\frac{3}{2}} r^2 - 8((2000))^{\frac{3}{2}} r^4 \\ +4(2000)^2 + 4(341.16)((2000))r^2 \\ +19(341.16)\sqrt{(2000)}r^4 - 4(341.16)\sqrt{(2000)}r^6 \end{array} \right)$$

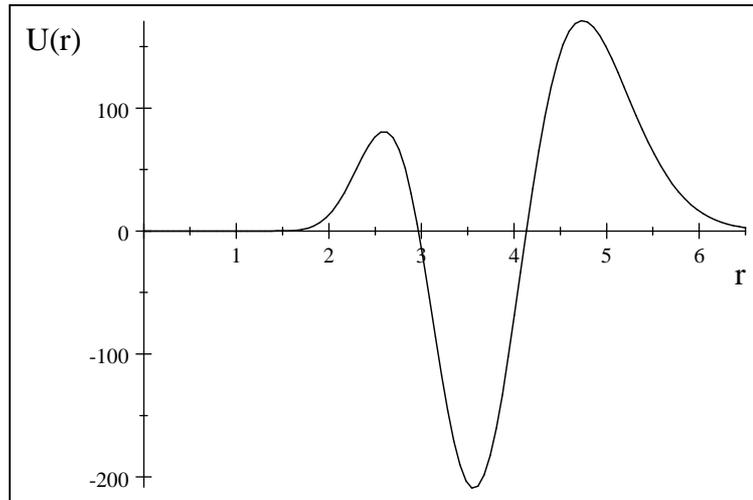


Fig (3-18) : La fonction d'onde non normalisée $U_2^{(1)}(r)$

Conclusion :

La courbe $U_2^{(1)}(r)$ présente deux nœuds, donc elle correspond au deuxième état excité, d'énergie $E_2^{(1)} = E_1^{(2)} = E_0^{(3)}$. Ainsi si on persévère, on peut trouver la hiérarchie de H_1 .

3.3 Conclusion

La notion de supersymétrie constitue un cadre élégant pour la résolution de l'équation de Schrödinger à une dimension. Elle donne une méthode systématique de factorisation de l'hamiltonien par l'introduction de la notion du superpotentiel, et qui peut fournir des résultats très satisfaisants.

Partie II

Les états de diffusion

Chapitre 4

Problème Inverse

4.1 Présentation du problème inverse

4.1.1 Historique

Le champ des problèmes inverses a été découvert et mis en place par Soviétique - Arménien physicien, Viktor Ambartsumian . Alors qu'il était encore étudiant, Ambartsumian soigneusement étudié la théorie de la structure atomique, la formation des niveaux d'énergie, et l'équation de Schrödinger et de ses propriétés, et quand il a maîtrisé la théorie des valeurs propres des équations différentielles, il a souligné l'apparente analogie entre niveaux d'énergie discrets et les valeurs propres des équations différentielles. Il a ensuite dégagé une interrogation : étant donné une famille de valeurs propres, est-il possible de trouver la forme des équations? Essentiellement Ambartsumian examinait le problème inverse de Sturm-Liouville, qui traite de déterminer les équations d'une corde vibrante. Cet article a été publié en 1929 dans le journal allemand physique *Zeitschrift für Physik* et est resté dans l'oubli pendant un temps assez long.

Néanmoins, vers la fin de la seconde Guerre mondiale, cet article, écrit par le jeune de 20 ans Ambartsumian, a été retrouvé par les mathématiciens suédois en formant le point de départ pour toute une zone de recherche sur les problèmes inverses, devenant ainsi le fondement de toute une discipline.

4.1.2 Définition

Un problème inverse est une situation dans laquelle on tente de déterminer les causes d'un phénomène à partir des observations expérimentales de ses effets. Par exemple, en sismologie, la localisation de l'origine d'un tremblement de terre à partir de mesures faites par plusieurs stations sismiques réparties sur la surface du globe terrestre est un problème inverse.

La résolution du problème inverse passe en général par une étape initiale de modélisation du phénomène, dite problème direct qui décrit comment les paramètres du modèle se traduisent en effets observables expérimentalement. Ensuite, à partir des mesures obtenues sur le phénomène réel, la démarche va consister à approximer au mieux les paramètres qui permettent de rendre compte de ces mesures.

Ce problème de prévoir le résultat des mesures s'appelle le problème de modélisation, le problème de simulation, ou le problème vers l'avant (direct). Le problème inverse se compose à employer le résultat réel de quelques mesures pour impliquer les valeurs des paramètres qui caractérisent le système.

Tandis que le problème vers l'avant (dans la physique déterministe) a une solution unique, au contraire du problème inverse. Comme exemple, considérer les mesures du champ de pesanteur autour d'une planète : si on donne la distribution de la masse à l'intérieur de la planète, nous pouvons uniquement prévoir les valeurs du champ de pesanteur autour de la planète (problème vers l'avant), mais il y a de différentes distributions de la masse qui donnent exactement le même champ de pesanteur dans l'espace en dehors de la planète. Par conséquent, le problème inverse suggère d'impliquer la distribution de masse des observations du champ de pesanteur aux solutions multiples (en fait, un nombre infini) [116, 117, 118].

Cette résolution peut se faire par simulation numérique ou de façon analytique. La résolution mathématique est rendue difficile par le fait que les problèmes inverses sont en général des problèmes mal posés, c'est-à-dire que les seules observations expérimentales ne suffisent pas à déterminer parfaitement tous les paramètres du modèle. Il est donc nécessaire d'ajouter des contraintes qui permettent de réduire l'espace des possibilités de façon à aboutir à une solution unique.

On retrouve des problèmes inverses dans de nombreux domaines scientifiques, en particulier dans l'étude de systèmes complexes pour lesquels on a accès qu'à un petit nombre de mesures,

par exemple : la Terre en géophysique, les tissus organiques en imagerie médicale, l'Univers en cosmologie, une salle de concert en acoustique architecturale...

4.1.3 Théorie

La théorie la plus générale (et la plus simple) est obtenue en utilisant un point de vue probabiliste, où l'information a priori sur les paramètres modèles est représentée par une distribution de probabilité de l'espace du modèle. La formulation probabiliste du problème inverse exige une résolution en termes d'échantillons, la distribution de probabilité dans l'espace modèle. Ceci, en particulier, signifie que la solution d'un problème inverse n'est pas un modèle mais une collection des modèles.

4.1.4 Equation de Schrödinger

Dès que Schrödinger eut abouti à ça fameuse équation, il se posa la question du **problème inverse** : puisque toute particule, peut être traitée comme une onde — peut-on retrouver la particule à partir d'une fonction d'onde solution de son équation ? Cela amène à se demander : qu'est ce qu'une fonction d'onde ? Est-ce un objet physique, ou bien un simple intermédiaire de calcul ?

Le fait est, que la fonction d'onde est une fonction complexe. Schrödinger proposa une explication, rapidement montrée incorrecte. C'est finalement Max Born [119] qui fournit en 1926 l'interprétation aujourd'hui majoritairement acceptée : la fonction d'onde elle-même n'a pas de réalité physique, mais le module de son carré,

$$|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$$

est une densité de probabilité, sous-entendu une densité de probabilité de trouver la particule. On dit aussi une densité de probabilité de présence, mais cela pourrait induire en erreur.

Cela signifie que la probabilité de trouver la particule dans un petit volume $d^3\tau$ est donnée par :

$$d^3P(r) = |\Psi(r)|^2 d^3\tau$$

Si on considère une particule, elle se trouve nécessairement quelque part, donc la probabilité de la trouver sur tout l'espace est 100%. Cela impose que la densité de probabilité vérifie une relation dite de normalisation :

$$\iiint |\Psi(r)|^2 d^3\tau = 1$$

4.2 Différence de phase pour une diffusion élastique

4.2.1 Introduction

Les expériences de diffusion ont joué un rôle fondamental dans la physique nucléaire, puisque les propriétés physiques et chimiques sont dominées par les électrons qui entourent le noyau. Ces expériences permettent à la fois d'étudier les détails des interactions entre les particules et la cible, et d'obtenir l'information sur la structure interne du noyau.

La section efficace est une définition nécessaire pour interpréter les résultats des expériences de diffusion. Elle est liée au fait que dans ce type d'expérience on ne peut pas envoyer une particule à la fois sur la cible. Les particules projectiles sont donc toujours en faisceau. De la même façon, la cible contient aussi de nombreuses particules. On ne peut jamais savoir à quel moment quelle particule incidente va interagir à quel endroit avec quelle particule cible. Par conséquent les résultats sont de nature statistique influencés par les détails du faisceau (le flux) et de la cible (densité et épaisseur). La section efficace nous permet d'enlever ces effets géométriques et de mesurer la dynamique de l'interaction entre une particule projectile et une particule cible. En réalité seule une fraction des diffusions est mesurée. La détection est limitée dans l'espace et les autres paramètres.

Dans une diffusion d'atomes ou moléculaires, la section efficace effective est définie par :

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_0^{\infty} (2l + 1) \sin^2 \delta_l \quad (4.1)$$

dans laquelle les termes de grandes valeurs de l jouent un rôle important et la phase peut être traitée convenablement avec la méthode **phase intégrale et le problème inverse**.

Dans les chapitres qui vont suivre la théorie de diffusion inverse est employé pour reconstruire

le potentiel d'interaction de manière à ce que la différence de phase soit une fonction du nombre quantique l . On admet que le potentiel d'interaction $V(r)$ pour les atomes alcalins [120] est

donné sous la forme $V_1(r) + V_2(r)$:

- un terme attractif qui décrit l'attraction de *van der Waals* [121].
- un terme répulsif qui provient de l'échange des électrons atomiques et qui peut dépasser le premier terme aux grandes distances entre particules.

Il est alors clair que la composante répulsive du potentiel de *Lennard-Jones* $\left(\frac{1}{r^{12}}\right)$ ne satisfait pas cette exigence, et une autre forme analytique a été suggérée jusqu'à maintenant pour représenter cet effet répulsif du type exponentiel $d.r^\beta e^{-\alpha r}$ avec les valeurs numériques suivantes [122] :

$d = 0.015, \alpha = 0.94, \beta = 2.20$ où d est une constante de couplage et α, β sont des paramètres.

L'interaction prend alors la forme :

$$V(r) = -\frac{c_6}{r^6} + d.r^\beta e^{-\alpha r} \quad (4.2)$$

Pour de grandes valeurs de r l'attraction de *van der Waals* joue un rôle dominant.

A une distance proche du premier point tournant l'influence de ces deux composantes s'ajoute et il sera donc nécessaire d'effectuer les calculs dans lesquelles ces deux composantes soient simultanément présentes. On peut traiter le problème de l'évaluation du changement de la phase d'un point de vue variationnel, et le résultat est défini sous une forme analytique approchée générale.

Dans ce qui va suivre nous allons étudier la différence de phase δ_l^{JWKB} utilisée dans le travail de Y. Boumadjane [122].

La phase **JWKB** est donnée par :

$$\delta_l^{JWKB} = \left(l + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{2} - k_0 r_0 + \int_{r_0}^{\infty} \left[\left(k_0^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right)^{\frac{1}{2}} - k_0 \right] dr \quad (4.3)$$

où : $k_0 = (2\mu E)^{\frac{1}{2}}$ est le vecteur d'onde incidente et $U(r) = 2\mu V(r)$.

4.2.2 Formulation du problème de diffusion

Pour obtenir des résultats sous une forme analytique, il convient d'aborder le problème du point de vue variationnel. En effet, généralisant les travaux de GAUSSORGUES dans sa thèse (1975) [123], CAO a formulé ce problème de la manière suivante [124].

Il propose le potentiel $V(r)$ comme suit :

$$V(r) = V_1(r) + V_2(r) \quad (4.4)$$

où : $V_1(r)$: l'interaction singulière attractive.

$V_2(r)$: La composante d'échange de l'action répulsive.

On pose l'équation d'onde radiale telle que :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2(r) \right) R_l(r) = 0 \quad (4.5)$$

où

$$k(r) = \sqrt{2\mu} \left(E_0 - V_1(r) - V_2(r) - \frac{l(l+1)}{\sqrt{2\mu}r^2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

et $\hbar = 1$

si on pose

$$k_1(r) = \sqrt{2\mu} \left(E_0 - V_1(r) - \frac{l(l+1)}{\sqrt{2\mu}r^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.6)$$

où μ est la masse réduite, E_0 est l'énergie incidente, et k_1 est le moment local classique, l'équation différentielle précédente (4.5) devient :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k_1^2(r) \right) R_l(r) = 2\mu V_2(r) R_l(r) \quad (4.7)$$

et la solution semiclassique [125, 126] de l'équation différentielle (4.7) s'écrit comme :

$$R_l(r) = \frac{A}{\sqrt{k_1(r)}} \begin{bmatrix} c^+(r) \exp \left\{ i \left(U_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right\} \\ -c^-(r) \exp \left\{ -i \left(U_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right\} \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

où A est une constante, $c^\pm(r)$ sont des fonctions arbitraires complexes, de r seulement

$$U_1(r) = \int_{r_{01}}^r k_1(r_1) dr_1$$

Le signe \pm correspond à la partie de $R_l(r)$ sortante et entrante. r_{01} joue le rôle d'un point tournant virtuel défini par $k_1^2(r_{01}) = 0$, tandis que dans le cadre de l'approximation **JWKB**, $k_1(r_{01})$ doit vérifier les deux conditions suivantes :

$$\frac{1}{2} \left| k(r)^{-\frac{3}{2}} \frac{d^2 k(r)^{-\frac{1}{2}}}{dr^2} \right| \ll \frac{1}{2} \left| \frac{d}{dr} \frac{1}{k(r)} \right| \ll 1 \quad (4.9)$$

Suivant [126] on adopte la condition suivante :

$$\frac{dc^+(r)}{dr} \exp \left\{ i \left(U_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right\} = \frac{dc^-(r)}{dr} \exp \left\{ -i \left(U_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right\} \quad (4.10)$$

Alors, il sera possible de montrer que l'équation différentielle précédente peut se ramener à un système de deux équations différentielles du premier ordre. En utilisant les deux conditions (4.9) et (4.10), et après un certain calcul long et simple on arrive à :

$$\frac{dc^+(r)}{dr} = \mu i \frac{V_2(r)}{k_1(r)} \left(c^+(r) - c^-(r) \exp \left\{ -2i \left(U_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right\} \right) \quad (4.11a)$$

$$\frac{dc^-(r)}{dr} = -\mu i \frac{V_2(r)}{k_1(r)} \left(c^+(r) \exp \left\{ 2i \left(U_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right\} - c^-(r) \right) \quad (4.11b)$$

ou encore on définit le système matriciel suivant :

$$\frac{dC(r)}{dr} = -\mu i \frac{V_2(r)}{k_1(r)} B(r) C(r) \quad (4.12)$$

avec

$$C(r) = \begin{pmatrix} c^+(r) \\ c^-(r) \end{pmatrix} \text{ et } B(r) = \begin{pmatrix} 1 & -\exp\left\{-2i\left(U_1(r) + \frac{\pi}{4}\right)\right\} \\ \exp\left\{2i\left(U_1(r) + \frac{\pi}{4}\right)\right\} & -1 \end{pmatrix} \quad ((BC))$$

Si on impose la condition suivante :

$$\int_{r_{01}}^r \frac{V_2(r)}{k_1(r)} \exp\left[\pm i\left(U_1(r) + \frac{\pi}{4}\right)\right] dr \ll \int_{r_{01}}^r \frac{V_2(r)}{k_1(r)} dr \quad (4.13)$$

en négligeant les termes non diagonaux ce qui est justifié à partir d'une distance r_d telle que la quantité $U_1(r)$ devient importante excluant ainsi la contribution des termes oscillatoires du type :

$$\exp\left\{\pm 2i\left(U_1(r) + \frac{\pi}{4}\right)\right\}$$

donc, la solution du système (4.12) devient alors :

$$c^\pm(r) = c^\pm(r_{01}) \exp\left(\pm \mu i \int_{r_{01}}^r \frac{V_2(r)}{k_1(r)} dr\right) \quad (4.14)$$

Si on veut inclure les termes non diagonaux le système (BC) constitue rigoureusement un système de deux équations différentielles du premier ordre couplées qui devient beaucoup plus difficile à traiter analytiquement.

La solution $R_l(r)$ peut s'écrire dans ce cas :

$$R_l(r) = \frac{A}{\sqrt{k_1(r)}} \begin{bmatrix} c^+(r) \exp\left\{i\left(U_1'(r) + \frac{\pi}{4}\right)\right\} \\ -c^-(r) \exp\left\{-i\left(U_1'(r) + \frac{\pi}{4}\right)\right\} \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

$$\text{avec } U_1'(r) = U_1(r) - \mu \int_{r_{01}}^r \frac{V_2(r)}{k_1(r)} dr$$

4.2.3 Différence de Phase

En utilisant la théorie de la matrice S , on peut montrer que :

$$S(l) = \exp[2i\delta(l)] = \frac{c^+(\infty)}{c^-(\infty)} \exp[2i\delta_1(l)] \quad (4.16)$$

où $\delta_1(l)$ est la phase relative à $V_1(r)$ quand $V_2(r) = 0$. Si on introduit la condition (4.12), l'expression précédente fournit le résultat important :

$$\delta(l) = \delta_1(l) - \mu \int_{r_{01}}^{\infty} \frac{V_2(r)}{k_1(r)} dr \quad (4.17)$$

qui exprime $\delta(l)$ linéairement en fonction de $V_2(r)$.

Nous allons présenter ici quelques valeurs de r_0 , r_{01} , r_{02} et $\delta(l)$ ainsi que $\delta(l)^{(1)}$ et $\delta(l)^{(2)}$ en fonction de l [127], résultats qui seront utilisés par la suite dans nos recherches proprement dites.

r_{01} : est la plus petite distance d'approche quand $V_1(r) = 0$.

r_0 : est la plus petite distance d'approche réelle lorsque $V(r) = V_1(r) + V_2(r)$.

Tableau (4-1) : Influence du nombre orbital l sur les points tournants r_{01} , r_{02} et r_0 [122].

l	r_{01}	r_{02}	r_0
0		7.2	6.5
5		7.2	6.6
10		7.6	6.8
15		7.9	7.4
20		8.3	7.5
25		8.9	8
30		9.5	8.6
35	7.8	9.5	9.3
40	9.4	10.1	10.3
45	10.7	11.2	11.1
50	11.9	12.2	12.1
75	17.9	17.9	17.9

l	r_{01}	r_{02}	r_0
100	24	24	24
125	30	30	30
150	36	36	36
175	41.5	41.5	41.5
200	47.5	47.5	47.5

Tableau (4-2) : Comparaison de $\delta(l)$, $\delta(l)^{(1)}$ et $\delta(l)^{(2)}$ pour des valeurs de la variable l [120].

l	$\delta(l)^{(1)}$	$\delta(l)^{(2)}$	$\delta(l)$
0		-33.3	-31.01
5		-26	-23.88
10		-19.8	-17.93
15		-14.6	-13.03
20		-10.4	-9.08
25		-7.0	-6.0
30		-4.45	-3.79
35	1.40	-2.64	-2.09
40	0.623	-1.44	-1.06
45	0.332	-0.726	-0.47
50	0.193	-0.339	-0.17

Dans le tableau (4-1), on montre la variation des termes en fonction du nombre orbital l .

r_{01} et r_{02} sont des points tournants qui correspondent respectivement à l'interaction de **VAN-DER-WAALS** seule ($D = 0$) et l'interaction d'échange seule. r_0 est évidemment la distance approchée quand les deux interactions sont présentes.

On remarque par ailleurs qu'à partir de $l = 50$ l'influence des deux interactions devient négligeable. Il serait incorrect d'estimer le point tournant avec $r_0 \simeq \frac{l}{k_0}$; ceci est vraie seulement pour des limites de l très grandes ($l \simeq 100$), et un petit changement de r_0 , modifie la phase **JWKB**.

Dans le tableau 2, on montre quelques valeurs de la phase en fonction de l . $\delta(l)^{(1)}$ est la phase correspond à l'interaction de **VAN-DER-WAALS** seule et $\delta(l)^{(2)}$ est la phase caractérisant l'interaction d'échange. Il est donc intéressant de noter que :

- a) les valeurs positives et négatives de $\delta(l)^{(1)}$ et $\delta(l)^{(2)}$ sont bien connues [128] et montrent le caractère répulsif et attractif des termes d'échange et de **VAN-DER-WAALS**.
- b) Le comportement de la phase $\delta(l)$ est dominé par l'influence de l'interaction d'échange.
- c) Au dessus de $l = 200$ le calcul montre que la phase tend rapidement vers zéro, pour $l = 50$ la phase change de signe et devient positive à partir de $l = 55$.

4.3 Détermination du potentiel par inversion

4.3.1 Introduction

le potentiel $V(r)$ est formulé en introduisant la méthode phase intégrale. Ce travail montre également comment la partie inaccessible du potentiel $V_2(r)$ peut être évitée en incluant un terme auxiliaire dans le potentiel $V(r)$. Le déphasage partiel correspondant au potentiel arbitraire est connu, mais le déphasage partiel $\delta(l)$ de $V(r)$ peut être calculé analytiquement en termes de $V_1(r)$ et le nombre quantique orbital l . Les calculs pour construire le potentiel désiré sont exécutés en incluant deux paramètres ajustables dans le potentiel arbitraire. Un choix approprié de ces paires de paramètres laisse reproduire le potentiel original dans le domaine entier.

Dans le cadre du formalisme de la diffusion inverse ainsi que l'approximation semiclassique, le problème inverse standard a été transformé pour inclure le potentiel arbitraire sous une forme

adaptée. Une nouvelle approche a été proposée dans ce contexte.

Dans la section précédente nous avons souligné que dans le problème des atomes du type alcalins, le potentiel d'interaction peut être représenté par deux composantes, la première représente le potentiel de Van-Der-Waals [120]. Le terme d'échange qui est exprimé sous forme d'une fonction exponentielle est moins bien connu et, du point de vue théorique, il serait peut être intéressant de développer une méthode qui permet de le déterminer d'une manière plus rationnelle.

Dans cette partie on propose de déterminer le potentiel $V_2(r)$ par le procédé d'inversion en se servant de la transformation d'**ABEL** entre autres [129, 130, 131, 132]. Le potentiel $V_2(r)$ sera exprimé par une intégrale qui peut être calculée numériquement dans le cadre de la diffusion élastique et les différences de phase $\delta(l)$ étant supposées connues à partir de l'expérience.

4.3.2 Inversion

La différence de phase s'écrit comme :

$$\delta(l) = \delta_1(l) - \mu \int_{r_1}^{\infty} \frac{V_2(r)}{k_1(r)} dr \quad (4.18)$$

où

$$k_1(r) = \sqrt{2\mu} \left(E_0 - V_1(r) - \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.19)$$

.on réécrit $k_1(r)$ avec une certaine modification en tenant compte que $k_1^2(r_{01}) = 0$. On peut définir $k_1(r)$ comme dans [124, 133].

$$k_1(r) = k_0 (r^2 - r_{01}^2)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{r} \{1 + R(r, r_{01})\}^{\frac{1}{2}} \quad (4.20)$$

avec

$$R(r, r_{01}) = \frac{r_{01}^2 V_1(r_{01}) - r^2 V_1(r)}{E_0 (r^2 - r_{01}^2)} \quad (4.21)$$

Remplaçant, l'expression de $R(r, r_{01})$ dans (4.20), il vient :

$$k_1(r) = \frac{k_0}{\sqrt{E_0}} \frac{1}{r} [E_0 (r^2 - r_{01}^2) + r_{01}^2 V_1(r_{01}) - r^2 V_1(r)]^{\frac{1}{2}} \quad (4.22)$$

ou encore

$$k_1(r) = \frac{k_0}{\sqrt{E_0}} \frac{1}{r} [r^2 (E_0 - V_1(r)) - r_{01}^2 (E_0 - V_1(r_{01}))]^{\frac{1}{2}} \quad (4.23)$$

on pose alors :

$$\begin{aligned} Y^2 &= r^2 (E_0 - V_1(r)) \\ Y_{01}^2 &= r_{01}^2 (E_0 - V_1(r_{01})) \\ \text{et } \frac{k_0}{\sqrt{E_0}} &= \sqrt{2\mu} \end{aligned}$$

on obtient alors :

$$k_1(r) = \sqrt{2\mu} \frac{1}{r} [Y^2(r) - Y^2(r_{01})]^{\frac{1}{2}} \quad (4.24)$$

On remplace $k_1(r)$ par sa forme simple dans l'équation (4.18) on obtient :

$$P(E_0, l) = \int_{r_{01}}^{\infty} \frac{r V_2(r)}{[Y^2 - Y_{01}^2]^{\frac{1}{2}}} dr \quad (4.25)$$

avec :

$$P(E_0, l) = -\sqrt{\frac{2}{\mu}} (\delta(l) - \delta_1(l))$$

on transforme cette intégrale :

$$P(E_0, l) = \int_{Y_{01}}^{\infty} \frac{r V_2(r)}{[Y^2 - Y_{01}^2]^{\frac{1}{2}}} \frac{dY}{dY} dr \quad (4.26)$$

avec

$$r \rightarrow r_{01}$$

$$Y \rightarrow Y_{01}$$

qui donne :

$$P(E_0, l) = \int_{Y_{01}}^{\infty} \frac{Y}{[Y^2 - Y_{01}^2]^{\frac{1}{2}}} D(E_0, l) dY \quad (4.27)$$

où :

$$D(E_0, Y) = V_2(r) \frac{dr^2}{dY^2} \quad (4.28)$$

Détermination de l'expression $D(E_0, Y)$

On multiplie l'équation (4.27) par $\frac{2Y_{01}}{(Y_{01}^2 - t^2)^{\frac{1}{2}}}$ et on intègre par rapport à Y_{01} de (t à ∞), on obtient alors :

$$\int_t^{\infty} P(E_0, l) \frac{2Y_{01}}{(Y_{01}^2 - t^2)^{\frac{1}{2}}} dY_{01} = \int_t^{\infty} dY_{01} \int_{Y_{01}}^{\infty} D(E_0, l) \frac{2Y_{01}Y}{(Y^2 - Y_{01}^2)^{\frac{1}{2}} (Y_{01}^2 - t^2)^{\frac{1}{2}}} dY \quad (4.29)$$

On intervertit les intégrales, on aura donc :

$$\int_t^{\infty} P(E_0, l) \frac{2Y_0}{(Y_{01}^2 - t^2)^{\frac{1}{2}}} dY_0 = \int_t^{\infty} D(E_0, l) Y dY \int_t^{\infty} \frac{2Y_0}{(Y^2 - Y_{01}^2)^{\frac{1}{2}} (Y_{01}^2 - t^2)^{\frac{3}{2}}} dY_{01} \quad (4.30)$$

Comme $\int_t^Y \frac{2Y_{01}}{(Y^2 - Y_{01}^2)^{\frac{1}{2}} (Y_{01}^2 - t^2)^{\frac{3}{2}}} dY_{01} = \pi$, l'équation (4.30), fournit :

$$\int_t^{\infty} P(E_0, l) \frac{2Y_{01}}{(Y_{01}^2 - t^2)^{\frac{1}{2}}} dY_{01} = \pi \int_t^{\infty} Y D(E_0, Y) dY \quad (4.31)$$

et on différencie la relation précédente par rapport à t , on obtient alors :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_t^\infty P(E_0, l) \frac{2Y_{01}}{(Y_{01}^2 - t^2)^{\frac{1}{2}}} dY_{01} &= \pi \frac{d}{dt} \int_t^\infty Y D(E_0, Y) dY \\ &= -\pi D(E_0, t).t \end{aligned} \quad (4.32)$$

et

$$\frac{d}{dt} \int_t^\infty P(E_0, l) \frac{2Y_{01}}{(Y_{01}^2 - t^2)^{\frac{1}{2}}} dY_{01} = -P(E_0, l(t)) \frac{2t}{(t^2 - t^2)} + \int_t^\infty P(E_0, l) \frac{2Y_{01}t}{(Y_{01}^2 - t^2)^{\frac{1}{2}}} dY_{01}$$

l'expression (4.32), fournit $D(E_0, Y)$ comme suit :

$$D(E_0, Y) = -\frac{2}{\pi} \int_t^\infty \frac{1}{(Y_{01}^2 - t^2)^{\frac{1}{2}}} \frac{dP(E_0, l)}{dY_{01}} dY_{01} \quad (4.33)$$

on remplace ensuite t par Y , il vient :

$$D(E_0, Y) = -\frac{2}{\pi} \int_Y^\infty \frac{1}{(Y_{01}^2 - Y^2)^{\frac{1}{2}}} \frac{dP(E_0, l)}{dY_{01}} dY_{01} \quad (4.34)$$

Ce résultat est intéressant pour les deux raisons suivantes [131] :

a) Existence de la solution, on peut, en effet démontrer facilement que $D(E_0, Y)$ est finie car l'intégrale est convergente.

b) Du fait de la propriété d'unicité de la transformation du type Abel, ce résultat est unique.

$P(E_0, l)$ étant connue, le calcul de l'intégrale donne la valeur de $D(E_0, Y)$, qui permet de remonter jusqu'à la quantité $V_2(r)$.

Détermination de l'expression de $\frac{dP_1(E_0, l)}{dl}$

Le problème consiste à représenter $\frac{dP_1(E_0, l)}{dl}$ par une fonction analytique de l qui est nécessaire pour le calcul de la quantité $D(E_0, Y)$.

On a :

$$D(E_0, Y) = -\frac{2}{\pi} \int_Y^\infty \frac{1}{(Y_{01}^2 - Y^2)^{\frac{1}{2}}} \frac{dP(E_0, l)}{dl} \frac{dl}{dY_0} dY_0 \quad (4.35)$$

la quantité $P(E_0, l)$ est donnée par la relation :

$$P(E_0, l) = \sqrt{\frac{2}{\mu}} (\delta_1(l) - \delta(l)) \quad (4.36)$$

avec

$$P_1(E_0, l) = \delta_1(l) - \delta(l) \quad (4.37)$$

Afin d'évaluer la quantité $D(E_0, Y)$, nous employons la différence de phase donnée dans le Tableau I de la Réf [127] , pour obtenir $P_1(E_0, l)$ dans une première étape, et par interpolation numérique on atteint la quantité $\frac{dP_1(E_0, l)}{dl}$ dans une deuxième étape,

$$\frac{dP_1(E_0, l)}{dl} = -2 \exp(-0,36(l-35)) \quad (4.38)$$

Donc, l'équation (4.35) prend la forme suivante :

$$D(E_0, Y) = \frac{4}{\pi} \sqrt{\frac{2}{\mu}} \int_Y^\infty \frac{\exp(-0,36(l-35))}{(Y_{01}^2 - Y^2)^{\frac{1}{2}}} \frac{dl}{dY_{01}} dY_{01} \quad (4.39)$$

on pose $l = \sqrt{2\mu} Y_{01}$, on obtient :

$$D(E_0, Y) = \frac{8}{\pi} \int_{\sqrt{2\mu}Y}^\infty \frac{\exp(-0,36(l-35))}{(l^2 - 2\mu Y^2)^{\frac{1}{2}}} dl \quad (4.40)$$

la singularité persiste encore au point $l = \sqrt{2\mu}Y$. Pour éviter cette singularité, nous employons la transformation de Buck [134] en posant :

$$l^2 - 2\mu Y^2 = z^2 \quad (4.41)$$

on obtient la forme finale :

$$D(E_0, Y) = \frac{8}{\pi} \int_0^\infty \frac{\exp\left(-0,36(\sqrt{z^2 + 2\mu Y^2} - 35)\right)}{(z^2 + 2\mu Y^2)^{\frac{1}{2}}} dz \quad (4.42)$$

4.3.3 Détermination de l'expression du potentiel $V_2(r)$

De l'équation (4.28), on tire alors $V_2(r)$:

$$V_2(r) = \frac{D(E_0, Y)dY^2}{dr^2} \quad (4.43)$$

on a :

$$Y^2 = r^2 (E_0 - V_1(r))$$

donc :

$$\frac{dY^2}{dr^2} = \frac{d}{dr^2} (r^2 (E_0 - V_1(r)))$$

ou encore :

$$\frac{dY^2}{dr^2} = E_0 - V_1(r) - \frac{r}{2} \frac{dV_1(r)}{dr}$$

Finalement, l'expression de $V_2(r)$ devient :

$$V_2(r) = D(E_0, Y) \left(E_0 - V_1(r) - \frac{r}{2} \frac{dV_1(r)}{dr} \right) \quad (4.44)$$

La relation de $V_2(r)$ relie $V_1(r)$ qui lui est supposé connu. On remplace ensuite $V_1(r)$ par sa forme, on obtient alors :

$$V_2(r) = D(E_0, Y) (E_0 - 2c_6 r^{-6}) \quad (4.45)$$

avec les valeurs numériques suivantes : $E_0 = 136.10^{-5}$, $\mu = 6000$, $c_6 = 93.06$

Application numérique

En appliquant l'équation (4.45), on construit $V_2(r)$ pour différentes valeurs de r , et les résultats sont affichés dans le tableau (4-3).

Tableau (4-3)

r	7.8	9.4	10.7	11.9
$D(E_0, Y)$	0.617 25	0.147 81	$2.893 3 \times 10^{-2}$	$5.562 5 \times 10^{-3}$
$V_2(r)$	$3.293 2 \times 10^{-4}$	$1.611 4 \times 10^{-4}$	$3.576 1 \times 10^{-5}$	$7.200 4 \times 10^{-6}$

La courbe suivante définit $V_2(r)$ pour différentes valeurs de r

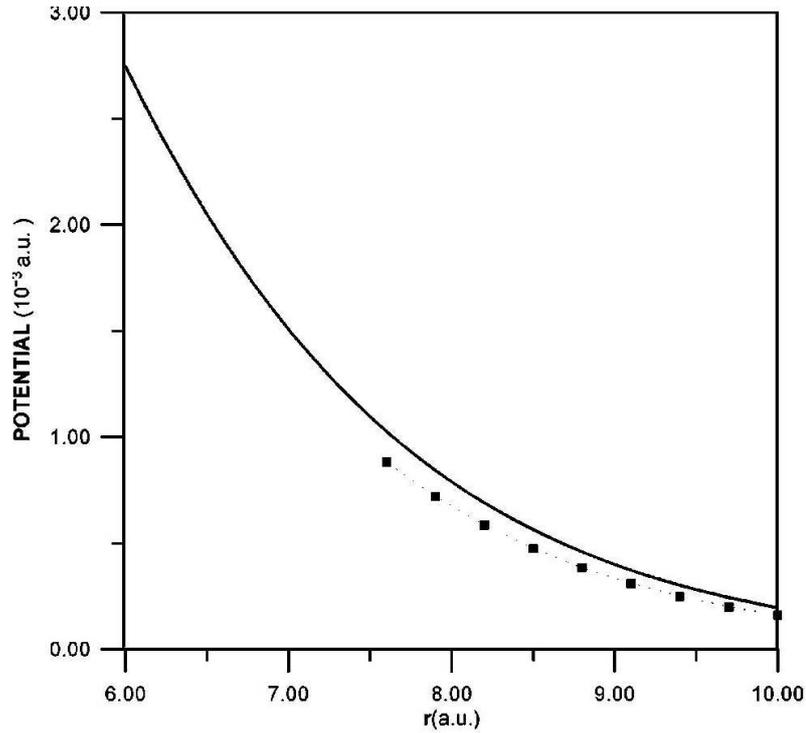


Figure (4-1) : Représentation du potentiel $V_2(r)$, où r est en a.u. courbe originale en trait plein, l'approche standard en symbole carré (Cao et Zerarka (1985)).

Discussion

Dans la fig (4-1), nous rapportons les résultats obtenus à partir de la relation (4.45) comparée à la courbe originale $V_2(r) = d.r^\beta e^{-\alpha r}$. Notez que le désaccord entre les courbes n'est pas surprenant mais peut être vu par l'utilisation de l'approximation (4.27), qui a été présentée précédemment pour produire les équations différentielles.

D'autre part, la région pour laquelle $r < 7,80$ ne peut pas être atteinte par le développement actuel car dans le cadre de l'approche de *la phase intégrale* conventionnelle, la quantité $k_1(r)$ devient imaginaire qui provoque une région interdite. Dans la section suivante, l'utilisation d'un terme auxiliaire supplémentaire convenablement choisi dans l'expression analytique du potentiel $v_a(r)$ peut, dans certains cas, faire incorporer une partie non-négligeable de cette région [122].

Chapitre 5

Le potentiel auxiliaire

Dans le chapitre précédent nous avons présenté le travail de Cao et Zerarka qui ont calculé le potentiel $V_2(r)$ par inversion au moyen de *la phase integrale* de la théorie de diffusion et ils ont montré, que la région où ($r < 7.80$) est inaccessible, elle correspond donc à une région interdite. Pour résoudre ces difficultés, on peut toujours imposer un potentiel auxiliaire arbitraire $v_a(r)$, qui respecte les conditions de validité de l'approximation *phase integrale* pour une énergie déterminée.

5.1 Proposition du potentiel auxiliaire

L'idée la plus simple proposé par A. Zerarka et Y. Boumadjane dans [122] est de modifier le potentiel $V(r)$ de telle manière qu'il conserve la même forme. Nous pouvons réécrire le potentiel $V(r)$ en présentant un potentiel arbitraire $V_a(r)$ menant à une nouvelle forme de $V(r)$ comme

$$V(r) = V_a(r) + v_2(r) \quad (5.1)$$

où

$$v_2(r) = V_1(r) + V_2(r) - V_a(r) \quad (5.2)$$

Visiblement le problème reste le même et la méthode précédente est applicable à condition d'effectuer les transformations suivantes :

$$V_1(r) \rightarrow V_a(r) \quad (5.3)$$

$$v_2(r) \rightarrow V_2(r) \quad (5.4)$$

Pour étendre cette situation au problème précédent et pour une raison de commodité liée au problème on choisit :

$$V_a(r) = \frac{a}{r^2} \quad (5.5)$$

L'équation de Schrödinger prend alors la forme

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k_{1a}^2(r) \right) R_l(r) = 2\mu v_2(r) R_l(r) \quad (5.6)$$

avec

$$k_{1a}^2(r) = 2\mu \left(E_0 - \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} - V_a(r) \right) \quad (5.7)$$

de sorte que la condition de validité sera vérifiée comme :

$$\left| \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{k_{1a}} \right) \right| \ll 1 \quad (5.8)$$

qui donne encore :

$$\frac{1}{2\mu r^3} \ll \sqrt{2\mu} \left(E_0 - \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} - V_a(r) \right)^{\frac{3}{2}} \quad (5.9)$$

Pour que la condition précédente soit vérifiée il faut choisir le paramètre libre a . En appliquant la condition

$$|l(l+1) + 2\mu a| \ll 1$$

on écrit $P_a(E_0, l)$ comme fonction de différence de phase en utilisant les conditions spécifiques de la validité de l'approche *phase intégrale*

$$P_a(E_0, l) = -\sqrt{\frac{2}{\mu}} (\delta(l) - \delta^a(l)) \quad (5.10)$$

La différence de phase $\delta^a(l)$ est donnée sous une forme analytique [124, 133] suivante :

$$\delta^a(l) = \frac{\pi}{4} \left[(2l+1)^2 - \sqrt{(2l+1)^2 + 8\mu a} \right] \quad (5.11)$$

Nous déduisons immédiatement l'intégrale $P_a(E_0, l)$ par la même démarche utilisée dans le cas standard :

$$D(E_0, Y) = -\frac{2}{\pi} \int_Y^\infty \frac{1}{(Y_0^2 - Y^2)^{\frac{1}{2}}} \frac{dP(E_0, l)}{dY_0} dY_0 \quad (5.12)$$

Finalement, on trouve le potentiel $V_2(r)$ qui s'exprime en fonction de $D(E_0, Y)$, $V_1(r)$ et $V_a(r)$:

$$V_2(r) = D(E_0, Y) \left(E_0 - V_a(r) - \frac{r}{2} \frac{dV_a(r)}{dr} \right) - V_1(r) + V_a(r) \quad (5.13)$$

On remplace ensuite $V_a(r)$ et $V_1(r)$ par ses formes, on obtient alors :

$$V_2(r) = E_0 D(E_0, Y) + c_6 r^{-6} + ar^{-2} \quad (5.14)$$

5.1.1 Application numérique

Tableau (5-1) : Représentation de points tournants classiques r_0 définies par $K_{1a}(r_{0a}) = 0$ et l'intégral $D(E_0, Y)$ en termes du nombre quantique orbital l , pour le cas $a = 0,00086$ [127].

l	r (a.u)	$D_a(E, Y_0)$	$V_2(r)$
20	4	-0.807	2.2773×10^{-2}
25	6.18	0.523	1.6930×10^{-3}
30	7.333	0.415	6.1451×10^{-4}
35	8.581	0.192	2.4478×10^{-4}
40	9.78	0.085	1.1534×10^{-4}

La courbe suivante définit $V_2(r)$ pour différentes valeurs de r

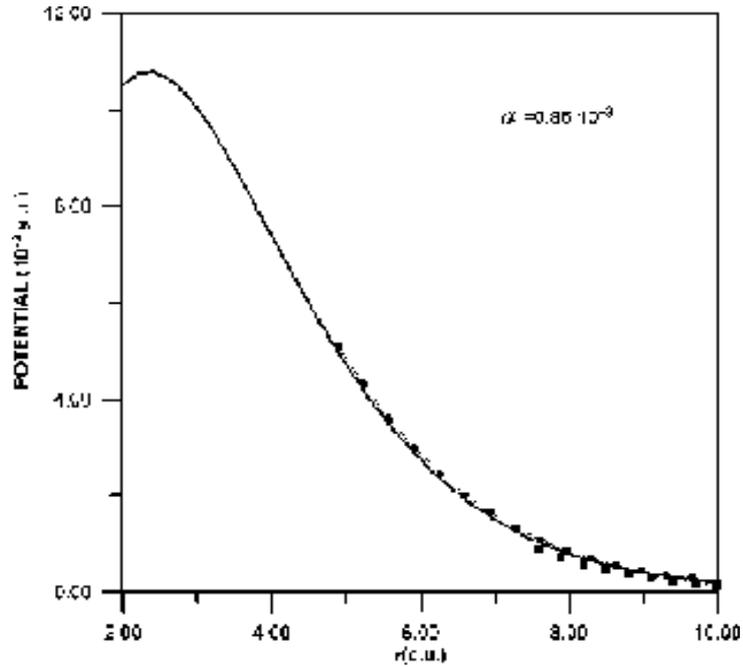


Fig (5-1) : Représentation du potentiel $V_2(r)$, où r est en a.u. Courbe originale en trait plein, l'approche standard en symbole carré (Cao et Zerarka (1985)) et les résultats avec le potentiel auxiliaire pour le cas $a = 0.00086$ en symbole rond.

Tableau (5-2) : Représentation de points tournants classiques r_0 définies par $K_{1a}(r_{0a}) = 0$ et l'intégral $D(E_0, Y)$ en termes du nombre quantique orbital l , pour le cas $a = -0,1$ [127].

l	$r(a.u)$	$D_a(E, Y_0)$	$V_2(r)$
36	2.76	-126	0.210 64
37	3.45	-24.72	$5.526 1 \times 10^{-2}$
38	4.041	-6.373	$2.142 4 \times 10^{-2}$
40	5.052	1.745	$5.631 1 \times 10^{-3}$
45	7.1	1.707	$7.435 2 \times 10^{-4}$
50	8.841	1.073	$2.058 8 \times 10^{-4}$

La courbe suivante définit $V_2(r)$ pour différentes valeurs de r

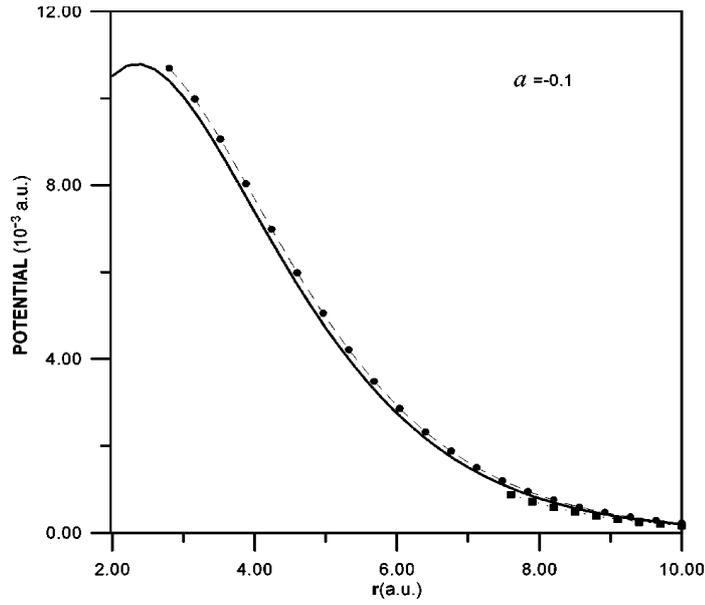


Fig (5-2) : Représentation du potentiel $V_2(r)$, où r est en a.u. Formule originale en trait plein, approche standard en symbole carré (Cao et Zerarka (1985)) et les résultats avec le potentiel auxiliaire pour le cas $a = -0.1$ en symbole rond.

Tableau (5-3) : Représentation de points tournants classiques r_0 définies par $K_{1a}(r_{0a}) = 0$ et l'intégral $D(E_0, Y)$ en termes du nombre quantique orbital l , pour le cas $a = -0,0005$.

l	$r(a.u)$	$D_a(E, Y_0)$	$V_2(r)$
10	2.451	-288.2	0.429 39
15	3.682	-18.64	$3.741 1 \times 10^{-2}$
20	4.001	-1.143	$2.273 9 \times 10^{-2}$
25	6.112	0.542	$1.808 1 \times 10^{-3}$
30	7.310	0.446	$6.259 9 \times 10^{-4}$
35	8.52	0.219	$2.551 4 \times 10^{-4}$
40	9.731	0.098	$1.186 8 \times 10^{-4}$

La courbe suivante définit $V_2(r)$ pour différentes valeurs de r

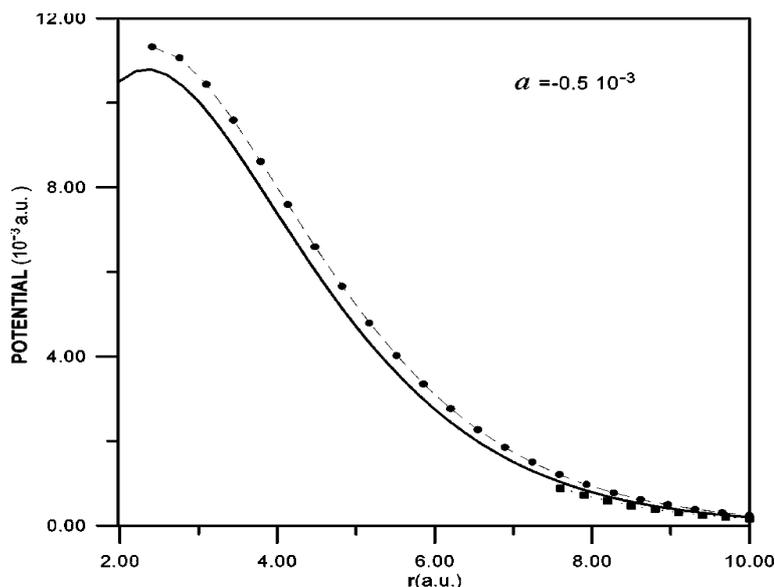


Fig (5-3) : Représentation du potentiel $V_2(r)$, où r est en a.u. Courbe originale en trait plein, l'approche standard en symbole carré (Cao et Zerarka (1985)) et les résultats avec le potentiel auxiliaire pour le cas $a = -0.0005$ en symbole rond.

5.1.2 Résultats et discussion

Les résultats dans les figures. 1,2 et 3 indiquent que les solutions numériques du potentiel $V_2(r)$ sont en bon accord avec les solutions analytiques. Notez également que toutes les courbes sont tracées par interpolation exponentielle en employant la meilleure adaptation de la méthode pour déterminer des tendances dans les données.

Comme nous l'avons déjà mentionné, notre intérêt particulier est de réduire la région interdite en employant la méthode phase-intégrale. C'est principalement dû au fait que $K_{1a}(r)$ devient imaginaire. Le potentiel a été construit avec les différentes valeurs de a , qui est un paramètre convenablement choisi [122]. Par exemple, nous voyons dans la fig. 1 que les deux potentiels sont semblables et la petite distance d'approche est $r = 4.91$.

De la même manière les figures. 2 et 3 les courbes sont semblables dans une certaine tolérance. D'un point de vue général, ceci est justifié, puisque nous avons supposé qu'à partir d'une certaine distance les limites donnent une contribution négligeable. Les valeurs $r = 2.76$ et

$r = 2.45$ sont les petites distances d'approche dans les figures. 2 et 3, respectivement.

Nous avons également présenté le potentiel $v_2(r)$ décrit dans l'approche standard dans le but de comparer les distances d'approche à celles étudiées dans le cas où le potentiel auxiliaire est présenté.

Selon le résultat précédent, la valeur $r = 7.8$ est la petite distance d'approche, d'après l'étude expérimentale de ces résultats, il s'avère clairement que les distances d'approche trouvées en présentant le potentiel auxiliaire $v_a(r)$ peuvent être considérées comme référence sur le choix du paramètre a .

Il a été donc prouvé que pour chaque paramètre a , la distance correspondante d'approche obtenue réduit la partie inaccessible imposée par la méthode phase-intégrale.

Nous pouvons conclure qu'il a été possible en employant la théorie inverse et la présentation de l'allure d'un potentiel arbitraire, de reconstruire le potentiel $v_2(r)$ et de limiter l'intervalle interdit.

5.2 Le potentiel auxiliaire amélioré

Dans cette section nous allons essayer d'atteindre la distance d'approche encore mieux, et de surmonter les difficultés indiquées précédemment, ceci en incluant un potentiel auxiliaire amélioré v_{aux} qui respecte les conditions d'applicabilité de l'approximation semi classique pour une énergie fixe.

5.2.1 Présentation du potentiel auxiliaire amélioré

Nous allons proposer un potentiel arbitraire de la forme suivante

$$V_{ab} = \frac{a}{r^2} + b \quad (5.15)$$

où a et b sont des paramètres arbitraires. Le potentiel $V(r)$ en présence du potentiel auxiliaire se présente alors sous la forme

$$V(r) = V_{ab}(r) + v_2(r) \quad (5.16)$$

où

$$v_2(r) = V_1(r) + V_2(r) - V_{ab}(r) \quad (5.17)$$

Visiblement le problème reste le même et la méthode précédente est applicable à condition d'effectuer les transformations suivantes :

$$V_1(r) \rightarrow V_{ab}(r) \quad (5.18)$$

$$v_2(r) \rightarrow V_2(r) \quad (5.19)$$

L'équation de Schrödinger prend alors la forme

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k_{1ab}^2(r) \right) R_l(r) = 2\mu v_2(r) R_l(r) \quad (5.20)$$

avec

$$k_{1ab}^2(r) = 2\mu \left(E_0 - \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} - V_{ab}(r) \right) \quad (5.21)$$

de sorte que la condition de validité sera vérifiée comme :

$$\left| \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{k_{1ab}} \right) \right| \ll 1 \quad (5.22)$$

qui donne encore :

$$-\frac{l(l+1) + 2\mu a}{r^3} \ll \left(2\mu E_0 - \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} - V_{ab}(r) \right)^{\frac{3}{2}}$$

ainsi on trouve la condition d'applicabilité pour les paires $\{a, b\}$

$$\left| \frac{L_a}{[2\mu(E_0 - b)r^2 - L_a]^{\frac{3}{2}}} \right| \ll 1 \quad (5.23)$$

où

$$L_a = l(l+1) + 2a\mu \quad (5.24)$$

Nous écrivons $P_{ab}(E_0, l)$ comme fonction des différences de phase en utilisant les conditions spécifiques de validité de l'approche *phase intégrale*

$$P_{ab}(E_0, l) = -\sqrt{\frac{2}{\mu}} \left(\delta(l) - \delta^{ab}(l) \right) \quad (5.25)$$

La différence de phase $\delta^{ab}(l)$ est donnée sous une forme analytique de la même façon que dans [146, 155] :

$$\delta^{ab}(l) = \frac{\pi}{2} \left[\sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\mu ab}{E_0}} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + 2\mu a} \right] \quad (5.26)$$

Nous déduisons immédiatement l'intégrale $P_a(E_0, l)$ par la même démarche utilisée dans le cas standard :

$$D_{ab}(E_0, Y) = -\frac{2}{\pi} \int_Y^\infty \frac{1}{(Y_{01}^2 - Y^2)^{\frac{1}{2}}} \frac{dP(E_0, l)}{dY_0} dY_0 \quad (5.27)$$

Finalement, on trouve le potentiel $V_2(r)$ qui s'exprime en fonction de $D(E_0, Y)$, $V_1(r)$ et $V_{ab}(r)$:

$$V_2(r) = D_{ab}(E_0, Y) \left(E_0 - V_{ab}(r) - \frac{r}{2} \frac{dV_{ab}(r)}{dr} \right) - V_1(r) + V_{ab}(r) \quad (5.28)$$

On remplace ensuite $V_{ab}(r)$ et $V_1(r)$ par ses formes, on obtient alors :

$$V_2(r) = (E_0 - b) D_{ab}(E_0, Y) + c_6 r^{-6} + a r^{-2} + b \quad (5.29)$$

5.2.2 Application numérique

Tableau (5-1) : Représentation de points tournants classiques r_{ab} définies par $K_{1ab}(r_{0ab}) = 0$ et l'intégral $D_{ab}(E_0, Y)$ en termes du nombre quantique orbital l , pour la paire $\{a, b\}_1 = \{-0.0024, -0.0012\}$

Tableau (5-1)

l	r_{ab}	$D_{ab}(E_0, Y)$	V_2
5	0.19764	$-1.6451 \cdot 10^8$	1.1403×10^6
10	1.6258	-526.41	3.6895
15	2.622	-25.415	0.28485
20	3.5685	-0.84426	4.1516×10^{-2}
25	4.4968	1.6654	1.4200×10^{-2}
30	5.4163	1.5944	6.4858×10^{-3}
35	6.3307	1.2242	3.3197×10^{-3}
40	7.2421	0.9234	1.7632×10^{-3}
45	8.1514	0.72797	9.4471×10^{-4}
50	9.0593	0.61211	5.061×10^{-4}

La courbe suivante définit $V_2(r)$ pour différentes valeurs de r

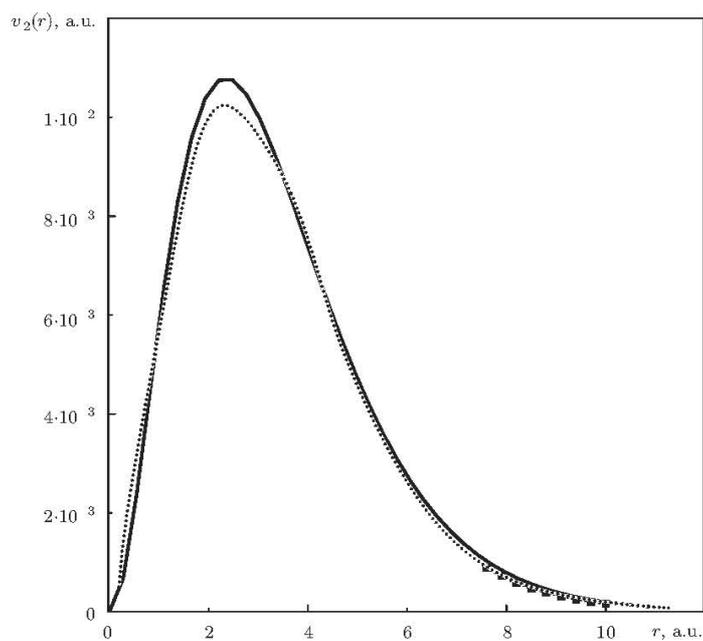


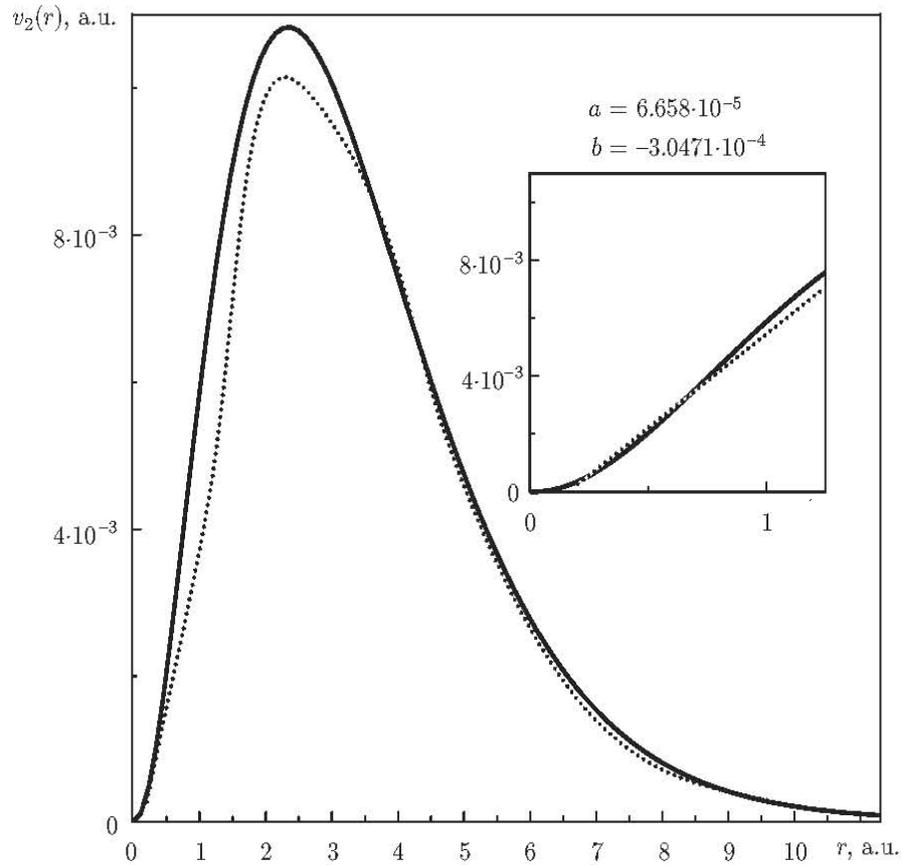
Fig (5-1) : Représentation du potentiel $V_2(r)$, où r est en a.u. Courbe originale en trait plein, les résultats avec le potentiel auxiliaire pour le cas $\{a, b\}_1 = \{-0.0024, -0.0012\}$ en ligne

discontinue $\{a, b\}_2 = \{6.658 \cdot 10^{-5}, -3.0471 \cdot 10^{-4}\}$

Tableau (5-2) : Représentation de points tournants classiques r_{ab} définie par $K_{1ab}(r_{0ab}) = 0$ et l'intégral $D_{ab}(E_0, Y)$ en termes du nombre quantique orbital l , pour la paire $\{a, b\}_2 = \{6.658 \cdot 10^{-5}, -3.0471 \cdot 10^{-4}\}$

l	r_{ab}	$D_{ab}(E_0, Y)$	V_2
0	0.19999	$-2.3566 \cdot 10^8$	1.7678×10^7
5	1.24169	-4109.3	18.55
10	2.35591	-81.534	0.40824
15	3.47191	-3.1118	4.7652×10^{-2}
20	4.58963	1.9936	1.2973×10^{-2}
25	5.70774	1.6725	5.1730×10^{-3}
30	6.82603	1.0107	2.2992×10^{-3}
35	7.94444	0.6117	1.0848×10^{-3}
40	9.06292	0.38492	5.0482×10^{-4}
45	10.1815	0.27275	2.3352×10^{-4}
50	11.3000	0.22103	1.0846×10^{-4}

La courbe suivante définit $V_2(r)$ pour différentes valeurs de r



Fig(5-2) : Représentation du potentiel $V_2(r)$, $0 \leq r \leq 11$ (agrandissement de la zone $0 \leq r \leq 1.25$) où r est en a.u. Formule originale en trait plein, les résultats avec le potentiel auxiliaire pour le cas $\{a, b\}_2 = \{6.658 \cdot 10^{-5}, -3.0471 \cdot 10^{-4}\}$ en ligne pointillé. La region inférieure à la zone interdite est égale à $r = 0.19$.

5.2.3 Résultats et discussion

Dans la figure (5-2) nous présentons le potentiel reconstruit (utilisant la deuxième paire des paramètres considérés) et le potentiel original comme fonctions de (r). Il est clair que les résultats sont excellents : les courbes coïncident avec un niveau important d'exactitude. Mais une petite différence entre le potentiel original $V_2(r)$ et nos calculs basés sur le potentiel obtenu utilisant la théorie de diffusion inverse près du maximum. Cette différence entre les courbes

peut être prévue ; elle est liée à l'approximation (4.13) pour découpler les équations.

Dans la figure (5-1) à titre de comparaison, nous présentons les potentiels $V_2(r)$ reconstruit en utilisant l'approche standard et le potentiel auxiliaire (avec les premières paires de paramètres). Nous pouvons noter deux points essentiels. D'abord, l'approche standard donne un résultat avec une gamme partielle, tandis que le résultat obtenu en utilisant le potentiel auxiliaire est nettement amélioré. En second lieu, y compris les paramètres libres a et b donnent une amélioration considérable de la procédure pour reconstruire le potentiel.

Mais l'erreur relative de $(V_{2,originale} - V_{2,calculé}) \times 100 / V_{2,originale}$ est approximativement égal à 0.04% dans toutes les figures.

Conclusion Générale

Dans nos actuelles études, nous avons réussie les étapes suivantes avec succès :

- Introduction d'un potentiel de type : $V(r) = ar^2 + br^{-4} + cr^{-6}$ dans l'équation de Schrödinger radiale indépendante du temps.
- La formulation de l'hamiltonien selon la MQSUSY.
- L'introduction du superpotentiel.
- Détermination des états liés (détermination des énergies).
- Description des états propres correspondantes.

Nous pouvons donc conclure pour cette partie que la supersymétrie est une hypothèse simplificatrice, c'est ce qui en fait l'attrait car la science cherche le simple et l'unité. Ce qu'il faut souligner, c'est que la supersymétrie s'inscrit dans les tentatives d'unir les forces de gravitation avec les champs électromagnétiques, la relativité générale avec la mécanique quantique. C'est une étape vers une théorie complète des interactions (électriques, magnétiques, gravitationnelle, faible et nucléaire) que certains appellent la théorie de tout, et dont la théorie des cordes pourrait être la préfiguration. De toute façon la supersymétrie n'a pas la prétention d'être une théorie ultime, plutôt une théorie effective supplémentaire qui nous rapproche de l'échelle de Planck où les différentes forces devraient s'unifier, et qui pourrait constituer l'accès à la théorie fondamentale.

Malheureusement aucun partenaire supersymétrique n'a encore été observé expérimentalement. Par exemple, on n'a jamais observé l'électron e^- de masse $m_e = 0.511MeV$, de charge $|q_e| = 1$ et de spin 0. On postule que les partenaires supersymétriques sont suffisamment massifs pour demeurer hors de portée des expériences menées jusqu'à maintenant. On s'attend cependant à ce que cette théorie soit plus vaste et plus fondamentale, et la recherche des indices expérimentaux qui confirmerait cette hypothèse se poursuit avec acharnement.

Pendant les trois dernières décennies, une attention considérable a été consacrée aux méthodes semiclassiques dans lesquelles plusieurs quantités physiques ont été dérivées. Nous notons que l'approximation phase-intégrale a récemment tiré bénéfice d'une attention particulière et a été la base d'un volume assez important de littérature en raison de ses applications variées dans divers domaines de la physique des plasmas à la théorie des particules élémentaires. L'approxi-

mation semiclassique (ou la méthode phase-intégrale) est un outil extrêmement important pour être employée dans la construction des solutions approximatives de l'équation de Schrödinger pour des systèmes quantiques.

La deuxième partie de la thèse se situe au niveau de l'identification du potentiel par la connaissance des énergies et les états correspondants. C'est un travail purement l'inverse du premier. Nous avons pu grâce à une interprétation quantique de diffusion inverse, afficher les résultats obtenus, qui sont avérés assez concluant pour accéder à la région interdite.

Selon les travaux qui ont été étudiés en 1985 par Cao et Zerarka, le terme d'échange qui exprime la fonction exponentielle du potentiel d'interaction des atomes du type alcalins n'est pas bien défini dans la diffusion élastique. Pour cela un développement d'une méthode qui permet de déterminer d'une manière plus rationnelle ce potentiel a été fait. Ils ont trouvé des résultats par l'application de la méthode « phase intégrale » par inversion avec le respect des conditions de validité.

Comme nous l'avons déjà mentionné, notre intérêt particulier est de réduire la région interdite qui a été trouvée dans le développement précédent en employant la méthode phase-intégrale. Ainsi nous avons identifié que le potentiel n'était pas représenté dans la région ($r < 7.80$) qui correspond à une région interdite.

Pour limiter cette région, nous avons présenté le travail introduit par [127]. Ce dernier a contribué par une légère modification sur la forme du potentiel en imposant un potentiel auxiliaire $v_a(r) = ar^{-2}$. Les résultats ont montré une efficacité de la méthode "phase intégrale" reflétant ainsi son éventuelle extension pour mieux améliorer la région interdite.

Dans le dernier chapitre nous avons tenté d'améliorer encore plus la région interdite ($r < 2.45$) qui correspond cette fois à une région non déterminée par le potentiel proposé en [127]. Une légère modification a été apportée au potentiel auxiliaire, en ajoutant un paramètre arbitraire b , nous a ramené à une identification presque parfaite de l'allure originale du potentiel selon les résultats expérimentaux.

Bibliographie

- [1] F. Abe and al. CDF collaboration, Phys. Rev. Lett. 74, 2626 (1995); S. Abachi and al, D0 collaboration, Phys. Rev. Lett. 74, 2632 (1995)
- [2] L. Infeld and T.E Hull, Rev. Mod. Phys. 23 (1951) 21.
- [3] F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, Supersymmetry and Quantum Mechanics, LA-UR-94-569. (2004).
- [4] V.A. Kostelecky and D. K. Campbell, Supersymmetry in Physics, North Holland (1985).
- [5] L. Alvarez-Gaumé, Jour. Phys. A16 (1983) 4177.
- [6] L. Alvarez-Gaumé and E. Witten, Nucl. Phys. B234 (1984) 269.
- [7] L. Alvarez-Gaumé, Bonn Summer School Lectures (1984), unpublished.
- [8] D. Friedan and P. Windey, Physica D15 (1985) 71.
- [9] G. Parisi and N. Surlas, Nucl. Phys. B206 (1982) 321.
- [10] F. Cooper and B. Freedman, Ann. Phys. 146 (1983) 262.
- [11] P. Salomonson and J. van Holten, Nucl. Phys. B196 (1982) 509.
- [12] M. Bernstein and L. Brown, Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 1933.
- [13] P. Kumar, M. Ruiz-Altaba and B.S. Thomas, Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 2749.
- [14] F. Marchesoni, P. Sodano and M. Zannetti, Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 1143.
- [15] W. Y. Keung, E. Kovacs and U. Sukhatme, Phys. Rev. Lett. 60 (1988) 41.
- [16] M. de Crombrugghe and V. Rittenberg, Ann. Phys. 151 (1983) 99.
- [17] L.F. Urrutia and E. Hernandez, Phys. Rev. Lett. 51 (1983) 755.
- [18] H. Ui, Prog. Theor. Phys. 72 (1984) 192, 813; H. Ui and A. Takeda, ibid. 72 (1984) 266.

- [19] A. Andrianov, N. Borisov and M. Ioffe, Phys. Lett. A105 (1984) 19, Phys. Lett. B181 (1986) 141; A. Andrianov, N. Borisov, M. Eides and M. Ioffe, Phys. Lett. A109 (1985) 143.
- [20] A. Khare and J. Maharana, Nucl. Phys. B244 (1984) 409.
- [21] A.B. Balantekin, Ann. Phys. 164 (1985) 277.
- [22] A. Kosteletsky and M.M. Nieto, Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 2285, Phys. Rev. A32 (1985) 1293,3243, Phys. Rev. Lett. 56 (1986) 96.
- [23] A. R. P. Rau, Phys. Rev. Lett. 56 (1986) 95.
- [24] C. Blockley and G. Stedman, Euro. Jour. Phys. 6 (1985) 218.
- [25] L. Gendenshtein, JETP Lett. 38 (1983) 356.
- [26] E. Schrödinger, Proc. Roy. Irish Acad. A46 (1940) 9.
- [27] W.T. Reid, Riccati Differential Equations, Math. in Sci. and Eng., Academic Press, N.Y. (1972).
- [28] A. Stahlhofen, Duke Univ. preprint (1989).
- [29] G. Darboux, C.R. Academy Sc. (Paris) 94 (1882) 1456.
- [30] P. Abraham and H. Moses, Phys. Rev. A22 (1980) 1333.
- [31] D. Pursey, Phys. Rev. D33 (1986) 1098, 1103, 2267; M. Luban and D. Pursey, ibid. D33 (1986) 431.
- [32] K. Chadan and P.C. Sabatier, Inverse Problems in Quantum Scattering Theory, Springer Verlag (1977).
- [33] M.M. Nieto, Phys. Lett. B145 (1984) 208.
- [34] C.V. Sukumar, Jour. Phys. A18 (1985) 2917, 2937.
- [35] A. Khare and U. Sukhatme, Jour. Phys. A22 (1989) 2847.
- [36] A. Khare and U. Sukhatme, Phys. Rev. A40 (1989) 6185.
- [37] W.-Y. Keung, U. Sukhatme, Q. Wang et T. Imbo, Jour. Phys. A22
- [38] T. Imbo and U. Sukhatme, Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 2184.
- [39] F. Cooper and P. Roy, Phys. Lett. A143 (1990) 202.

- [40] A. Comtet, A. Bandrauk and D.K. Campbell, Phys. Lett. B150 (1985) 159.
- [41] A. Khare, Phys. Lett. B161 (1985) 131.
- [42] R. Dutt, A. Khare and U. Sukhatme, Am. Jour. Phys. 59 (1991) 723.
- [43] B. Thaller, The Dirac Equation, Springer Verlag (1992).
- [44] F. Cooper, A. Khare, R. Musto, and A. Wipf, Ann. Phys. 187 (1988) 1.
- [45] Y. Nogami and F. Toyama, Phys. Rev. A47 (1993) 1708.
- [46] C.V. Sukumar, Jour. Phys. A18 (1985) L697.
- [47] E. D'Hoker and L. Vinet, Phys. Lett. B137 (1984) 72.
- [48] H. Yamagishi, Phys. Rev. D29 (1984) 2975.
- [49] V. Rubakov and V. Spiridonov, Mod. Phys. Lett. A3 (1993) 1337.
- [50] A. Khare, Jour. Phys. A25 (1992) L749, Jour. Math. Phys. 34 (1993) 1277.
- [51] A. Khare, A.K. Mishra and G. Rajasekaran, Mod. Phys. Lett. A8(1993) 107.
- [52] A. Khare, A.K. Mishra and G. Rajasekaran, Int. Jour. Mod. Phys. A8 (1993) 1245.146
- [53] A. Jevicki and J. Rodrigues, Phys. Lett. B146 (1989) 55.
- [54] M. Shifman, A. Smilga and A. Vainshtein, Nucl. Phys. B249 (1988)79.
- [55] J. Casahorran and S. Nam, Int. Jour. Mod. Phys. A6 (1991) 2729; J Casahorran, Phys. Lett. B156 (1991) 1925 : P. Roy, R.Roychoudhury et Y.P. Varshni, Jour. Phys. A21 (1988) 3673.
- [56] P. Roy and R. Roychoudhury, Phys. Rev. D32 (1985) 1597.
- [57] P. Panigrahi and U. Sukhatme, Phys. Lett. A178 (1993) 251.
- [58] J. Pappademos, U. Sukhatme and A. Pagnamenta, Phys. Rev. A48 (1993) 3525.
- [59] J. von Neumann and E. Wigner, Zeit. Phys. 30 (1929) 465.
- [60] F. Stillingner and D. Herrick, Phys. Rev. A11 (1975) 446.
- [61] L.E. Ballentine, Quantum Mechanics, Prentice Hall, PP. 205 (1990).
- [62] G. D. Mahan, jour. Chem-Phys. 51 3 631 (1969)
- [63] Super-Kamiokande Collaboration, "Evidence for oscillation of atmospheric neutrino", Phys. Rev. Lett. 81 (1998) 1158-1162.

- [64] S.T.Petcove, Sov. J., Nucl. Phys. 25 (1977)
- [65] R. Mohapatra, G. Senjanovic, Phys. Rev. D23 (1981) 165
- [66] P. Langacker, Neutrinos, ed. H.V. Klador, Springer-Verlag (1988)
- [67] J. W. F. Valle, CERN-TH 6597/92.
- [68] G. Dutta, A.S. Joshipura, Phys. Rev. D51(1995) 3883
- [69] S. M. Bilenky and S.T. Petcov, Rev. Mod. Phys. 59(1987) 671
- [70] W. Grimus, H. Neufeld, Phys. Lett. B486(2000) 385
- [71] K. Geun-Beom, Thèse de Doctorat « Recherche des sélectrons, neutralinos et squarks dans le cadre du modèle GMSB avec le détecteur CMS. Etude de la compression sans pertes de données provenant du calorimètre électromagnétique » Phy Nucl. Strasbourg (2001).
- [72] S. Coleman and J. Mandula, Phys. Rev. 159 (1967) 1251.
- [73] Yu. A. Gol'fand and E. P. Likhtman, JETP Lett. 13 (1971) 323.
- [74] R. Haag, J. Lopuszanski and M. Sohnius, Nucl. Phys. B 88 (1975) 257.
- [75] J. Wess et J. Bagger, "Supersymmetry and Supergravity", Princeton Series in Physics,ed. P. W. Anderson and A. S. Wightman.
- [76] J. Wess and B. Zumino, Nucl. Phys. B 70 (1974) 39.
- [77] A. Salam and J. Strathdee, Nucl. Phys. B 76 (1974) 477.
- [78] A. Salam and J. Strathdee, Nucl. Phys. B 80 (1974) 499.
- [79] S. Ferrara, B. Zumino and J. Wess, Phys. Lett. B 51 (1974) 239.
- [80] D. F. Brewer, "Supersymmetry, Superfields and Supergravity : an introduction", Graduate Student Series in Physics.
- [81] S. Ferrara, "Supersymmetry", North Holland/World Scientific.es" thèse de doctorat, Phys Thq. Unv de Paris (1998).
- [82] T. Kugo and P. Townsend, "Supersymmetrie and the division algebras", Phys Nucl. B221, 357 (1983).
- [83] J. C. Pati and A. Salam, Phys. Rev. D 10 (1974) 275.

- [84] H. Georgi and S. L. Glashow, Phys. Rev. Lett. 32 (1974) 438.
- [85] R. N. Mohapatra, "Unification and Supersymmetry", Second Edition, Graduate Texts in Contemporary Physics, Springer-Verlag.
- [86] G. G. Ross, "Grand Unified Theories", Frontiers in Physics, The Benjamin/ Cummings Publishing Company, Inc.
- [87] D. Baye. Physique quantique et statistique. Presses Universitaires de Bruxelles, 2003.
- [88] The Free Encyclopedia Wikipedia. Supersymmetry; Quantum Field Theory. <http://en.wikipedia.org/wiki>, 2005.
- [89] Ming-Tang Lee and Hsiang-Nan Li "Supersymmetric Quantum Mechanics with Spin-Orbit Couplings" The physical society of the republic of China, Univ of Chung-Cheng. 1996
- [90] H. Yamagishi, Phys. Rev. D29, 2975 (1984); Ig. Tamm, Z. Phys. 71, 141 (1931); T. T. Wu et C. N. Yang, Nucl. Phys. B107, 365 (1976).
- [91] A. Khare F. Cooper and U. Sukhatme. Supersymmetry in Quantum Mechanics. World Scientific, 2001.
- [92] M-Elise. Ernould. " La supersymétrie en mécanique quantique" projet de phys mathématique, 2005
- [93] L. Landau and E. Lifshitz, Nonrelativistic Quantum Mechanics Volume3, Pergamon Press, N.Y. (1977).
- [94] C. C. Tannoudji, B. Diu, and F. Laloé, Hermann, (1996) Paris.
- [95] A. Messiah, Mécanique quantique, Tome 1,2, Dunod, (1997).
- [96] E. Durant, Mécanique quantique, Tome 1, Masson et C^{ie}, (1970), Paris.
- [97] E. H. Wichmann, Berkeley, Physique quantique, Tome 4, Parie (1981).
- [98] J. P. Derendinger, Lectures Notes on "Globally Supersymmetric Theories in Four and Two Dimensions", ETH-TH / 90-21 (Juillet 1990).
- [99] G. F. Giudice and R. Rattazzi, Phys. Rep. 322 (1999) 419; 322 (1999) 50.
- [100] H. Murayama " Supersymmetry Phenomenology ", Phys. Univer California USA. ICTP (1999).

- [101] S. P. Martin "A Supersymmetry Primer ", Phys. Univer Michigan USA. hep-ph/9709356. v3 April7, 1999.
- [102] G. Junker. Supersymmetric Methods in Quantum and Statistical Physics. Springer, 1996.
- [103] E. Witten, Nucl. Phys. B202 (1982) 253
- [104] A. Riotto and M. Trodden recent progress in baryogenesis, hep-ph 9901362
- [105] P. Binétruy, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 62.A-C (1998) 152
- [106] M. Znojil, Math. Phys. 31 (1990) 108.
- [107] E. Papp, Phys. Lett. A 157 (1991) 192.
- [108] R. S Kaushal, Ann. Phys. (NY) 206 (1991) 90.
- [109] M Znojil, Phys. Lett. A 158 (1991) 436.
- [110] F. M. Fernandez. Phys. Lett. A 160 (1990) 511.
- [111] R. S Kaushal and D. Parashar, Phys. Lett. A 170 (1992) 335.
- [112] R. Guardiola and J. Ros, J. Phys. A 25 (1992) 1315.
- [113] M. Landtman, Phys. Lett. A 175 (1993) 147.
- [114] Y. P. Vashni, Phs. Lett. A 183 (1993) 9-13.
- [115] N. Bensalah " Etats liés exacts ou quasi-exacts de certaines interactions atomiques et moléculaires" thèse de magister. Biskra, Algérie (2003)
- [116] A. Tarantola, Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation, Inst de Physique du Globe de Paris, Univ de Paris 6 Paris, France. SIAM (2005).
- [117] Chadan, Khosrow & Sabatier, Pierre Célestin . Problèmes inverses en théorie de diffusion quantique. Springer-Verlag. (1977)
- [118] Aster, Richard [and al.] Elsevier paramètre. Estimation inverses et les problèmes,. (2004).
- [119] Max Born : « Zur Quantenmechanik der Stoßvorgänge », Zeitschrift für Physik 37 863-867 (1926). Reçu le 25 juin 1926. Publié le 10 juillet 1926.
- [120] E. Roueff, J. Phys. B 7, 185 (1974).
- [121] J. Goodisman, Diatomic Interaction Potential Theory, Vol. 2, Acad. Press, New York (1973); A. Dalgarno, "New methods for calculating long-range intermolecular forces,"

- in : Intermolecular Forces (Adv. Chem. Phys., Vol. 12, J. O. Hirschfelder, ed.), Wiley, New York (1967), p. 143.
- [122] Y. Boumedjane, "Extraction des énergies et identifications des états correspondants aux interactions centrales des systèmes atomiques ou moléculaires". thèse de Doctorat, unv Moh Khider Biskra, Algérie (2006).
- [123] C. Gaussorgues : Thèse Paris (1975)
- [124] X. C. Cao and M. N. Tran, Observatoire de Paris Meudon, Internal Report No., (1976).
- [125] L. Schiff, Quantum Mechanics (3rd ed.), McGraw-Hill, New York (1968).
- [126] P. O. Froman, The JWKB Approximation, North-Holland, Amsterdam (1965).
- [127] A. Zerarka, Y. Boumadjane, J. Hans, Unv Moh Khider Biskra, Algérie (2002).
- [128] MOTT, MASSEY, the theory of atomic collisios, 1965
- [129] W. H. Miller, J. Chem. Phys. 51, 3631 (1969).
- [130] X. C. Cao, ICTP Trieste, International Report No. IC/78/140, (1978).
- [131] A. Zerarka, X. C. Cao, Thèse de Magister, (1985)
- [132] R. F. Cameron and S. Mckee, Int. J. Numer. Methods Eng, 19, 157 (1983).
- [133] X. C. Cao, M. N. Tran, and J. Picard, Contribution (1977).
- [134] U. Buck, J. Chem. Phys, 54, 1923 (1977).

INVERSE POTENTIAL SCATTERING PROBLEM AND ITS APPLICATION TO THE Na–He SYSTEM

A. Zerarka,* N. Bensalah,* and J. Hans*

We use the phase-integral approximation in the frame of the inverse scattering theory to reconstruct a potential of the type $v = v_1 + v_2$ in which one component v_1 is assumed to be known a priori. We introduce an auxiliary potential with two adjustable parameters and show that the unattainable potential range (i.e., the range in which the potential cannot be reconstructed using this method) can be significantly reduced. An excellent agreement is obtained between the original potential and the current results in almost the entire range.

Keywords: phase integral, phase shift, inverse scattering theory

1. Introduction

During the past three decades, considerable attention has been devoted to the development of semiclassical methods in which several physical quantities have been derived. We note that the phase-integral approximation has recently benefited from special attention and has been the base for a great amount of literature because of its wide applications in various areas from plasma physics to elementary particle theory.

The semiclassical approximation (or phase-integral method) is an extremely important tool used both as a convenient means for constructing approximate solutions of the Schrödinger equation and as a basis for understanding the transition to the classical limit for quantum systems. The applicability condition for the phase-integral method is satisfied only if on any interval where the potential changes significantly, the wave function oscillates several times.

Using the phase-integral method to construct the interaction potential from structural data obtained from scattering experiments has been the subject of much research. Consistent results in the physics of liquids and the physics of collisions were discussed in detail in [1].

In this paper, inverse scattering theory is used to reconstruct the interaction potential from the phase shift as a function of the quantum number l . The full potential $v(r)$ is assumed to have the form $v_1(r) + v_2(r)$, where the first term represents the van der Waals attractive interaction [2] and the second term describes the electrostatic repulsion of the atomic electrons. The partial phase shift corresponding to an arbitrary potential is derived analytically, but the total partial phase shift $\delta(l)$ for $v(r)$ remains unchanged and can always be calculated analytically in terms of $v_1(r)$ and the orbital quantum number l . The calculations for constructing the sought potential are performed by including two adjustable parameters in the arbitrary potential. A suitable choice of these pairs of parameters allows reproducing the original potential in the full range.

In the framework of the formalism of the inverse scattering together with the semiclassical approximation, we transform the standard inverse problem to include the arbitrary potential in a suitable form. We

*Département de Physique Théorique, Université Med Khider, Biskra, Algeria, e-mail: azerarka@hotmail.com.

Translated from *Teoreticheskaya i Matematicheskaya Fizika*, Vol. 142, No. 3, pp. 556–568, March, 2005. Original article submitted November 10, 2003; revised June 15, 2004.

propose a new approach and prove the obtained relations by standard calculations. The results obtained for four pairs of parameters show that introducing the auxiliary potential gives very promising results.

On the other hand, many parameter-fitting procedures for constructing the potentials from the phase shifts have been proposed; the results of these works are described in [3]. There are several papers concerning the determination of the potential from experimental data (see, e.g., [4]).

This paper is organized as follows. In Sec. 2, we briefly consider a statement of the scattering problem that, with several assumptions following from the semiclassical approximation method, allows obtaining the full phase shift. In Sec. 3, we describe the standard approach and the mathematical frame used to solve the inverse problem via a phase-integral approach and the Abelian transformation technique, which allows deriving a formal relation between $v_2(r)$, $v_1(r)$, and the phase shift $\delta(l)$. We present an application to a system consisting of an alkali metal atom and a rare gas atom (Na-He). In Sec. 4, we generalize the standard approach by introducing an arbitrary potential in the theory. Section 5 contains discussion and conclusions.

Atomic units are used throughout unless otherwise stated.

2. Formulation of the scattering problem

The inverse procedure for reconstructing the potential using the Abel transformation [5] is formulated in the framework of the semiclassical approximation. The inverse scattering theory and the phase-integral method together with adequate physical arguments can offer a more effective approach for investigating the unknown potential at a fixed energy.

To explain the phase-integral method, we consider the elastic scattering problem for a system with a centrally symmetric potential $v(r) = v_1(r) + v_2(r)$. The Schrödinger equation for the l th partial wave is

$$\Delta\Psi + K_1^2(r)\Psi = 2\mu v_2(r)\Psi, \quad (1)$$

where $K_1(r)$ is the local classical momentum,

$$K_1^2(r) = \left[2\mu E_0 - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2\mu v_1(r) \right], \quad (2)$$

μ is the reduced mass, E_0 is the incident energy, and \hbar is taken equal to unity. Let r_{01} be the classical turning point given by the condition that the local classical momentum vanishes, i.e., $K_1^2(r_{01}) = 0$.

The semiclassical solution [6], [7] can be written as

$$\Psi(r) = \frac{A}{\sqrt{K_1(r)}} \left[c^+(r) \exp \left[i \left(S_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right] - c^-(r) \exp \left[-i \left(S_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right] \right], \quad (3)$$

where A is a constant,

$$S_1(r) = \int_{r_{01}}^r K_1(r_1) dr_1,$$

and $c^\pm(r)$ are arbitrary complex functions.

Imposing the condition

$$\frac{dc^+(r)}{dr} \exp \left[i \left(S_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right] - \frac{dc^-(r)}{dr} \exp \left[-i \left(S_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right] = 0 \quad (4)$$

on the unknown functions $c^\pm(r)$ and using the specific validity conditions for the semiclassical approximation [7], we can show that these functions must satisfy a system of coupled first-order differential equations, which can be written in the matrix form

$$\frac{dC}{dr} = i\mu \frac{v_2(r)}{K_1(r)} BC, \quad (5)$$

where the matrices C and B are formulated as

$$C = \begin{bmatrix} c^+(r) \\ c^-(r) \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} 1 & \exp\left[i\left(S_1(r) + \frac{\pi}{4}\right)\right] \\ \exp\left[-i\left(S_1(r) + \frac{\pi}{4}\right)\right] & -1 \end{bmatrix}.$$

To solve equation (5), it is useful to note that $S_1(r)$ is usually a rapidly increasing function of r , which leads to a strong oscillation of the exponential term $e^{\pm iS_1(r)}$, and we can therefore use the approximation

$$\int_{r_{01}}^r \frac{v_2(r_1)}{K_1(r_1)} \exp\left[\pm i\left(S_1(r_1) + \frac{\pi}{4}\right)\right] dr_1 \ll \int_{r_{01}}^r \frac{v_2(r_1)}{K_1(r_1)} dr_1, \quad (6)$$

which decouples Eq. (5). Therefore,

$$c^\pm(r) = c^\pm(r_{01}) \exp\left[\mp i\mu \int_{r_{01}}^r \frac{v_2(r_1)}{K_1(r_1)} dr_1\right],$$

where $c^\pm(r_{01})$ are constants to be determined from the initial conditions. Furthermore, if $\delta^{(1)}(l)$ represents the semiclassical phase shift corresponding to the influence of the first term $v_1(r)$ in the absence of the second term, then from the usual S -matrix theory,

$$S(l) = e^{2i\delta(l)} = \frac{c^+(\infty)}{c^-(\infty)} e^{2i\delta^{(1)}(l)},$$

we can extract the full phase shift for the considered system in terms of the orbital quantum number l :

$$\delta(l) = \delta^{(1)}(l) - \mu \int_{r_{01}}^\infty \frac{v_2(r_1)}{K_1(r_1)} dr_1. \quad (7)$$

3. Determining the potential $v_2(r)$: A standard approach

In this section, we obtain an analytical expression for the potential $v_2(r)$ by an inverse procedure using the Abel transformation [5]. The potential $v_2(r)$ is expressed as an integral that can be calculated numerically in the framework of the elastic scattering model.

We now define the quantities

$$P(E_0, l) = -\sqrt{\frac{2}{\mu}} [\delta(l) - \delta^{(1)}(l)], \quad (8)$$

$$D(E_0, Y) = v_2(r) \frac{dr^2}{dY^2}, \quad (9)$$

where

$$Y^2(r) = Y^2 = r^2(E_0 - v_1(r)), \quad (10)$$

$$Y^2(r_{01}) = Y_{01}^2 = r_{01}^2(E_0 - v_1(r_{01})).$$

Relation (2) can be written as

$$K_1(r) = \sqrt{2\mu} \frac{1}{r} [Y^2 - Y_{01}^2]^{1/2}. \quad (11)$$

From (7), relation (8) becomes

$$P(E_0, l) = \int_{Y_{01}}^{\infty} dY \frac{D(E_0, Y)Y}{\sqrt{Y^2 - Y_{01}^2}}. \quad (12)$$

We can now multiply both members of Eq. (12) by $2Y_{01}/\sqrt{Y_{01}^2 - t^2}$ and integrate over Y_{01} from t to ∞ , where t is an arbitrary parameter. Using the relation

$$\int_t^Y \frac{2Y_{01}}{\sqrt{(Y_{01}^2 - t^2)(Y^2 - Y_{01}^2)}} dY_{01} = \pi,$$

we then have

$$\int_t^{\infty} P(E_0, l) \frac{2Y_{01}}{\sqrt{Y_{01}^2 - t^2}} dY_{01} = \pi \int_t^{\infty} D(E_0, Y)Y dY. \quad (13)$$

Differentiating both sides of the obtained equation with respect to t and integrating by parts, we obtain

$$D(E_0, Y) = -\frac{2}{\pi} \int_Y^{\infty} \frac{1}{\sqrt{Y_{01}^2 - Y^2}} \frac{dP(E_0, l)}{dY_{01}} dY_{01}, \quad (14)$$

where t is replaced with Y .

We stress that this result is interesting in the sense that the existence and uniqueness of the solution of the inverse problem is completely guaranteed in this case. Indeed, on one hand, it can be shown that the integral in (14) always converges; on the other hand, the uniqueness of this type of Abel transformation is well known. The final analytic expression for reconstructing the potential $v_2(r)$ follows from Eqs. (9), (10), and (14),

$$v_2(r) = D(E_0, Y) \left[E_0 - v_1(r) - \frac{r}{2} \frac{dv_1(r)}{dr} \right]. \quad (15)$$

In other words, given $v_1(r)$ and $\delta(l)$, it is always possible to obtain $v_2(r)$ and therefore $v(r)$. To evaluate $D(E_0, Y)$, at the first step, we obtain $P(E_0, l)$ using the phase shifts given in Table 1 and then, at the second step, obtain the quantity $dP(E_0, l)/dY_{01}$ by interpolating. From the computational standpoint, to avoid the singularity at $Y = Y_{01}$, it is convenient to use the Buck transformation [8], $l^2 - 2\mu Y^2 = z^2$, which transforms integral (14) into

$$D(E_0, Y) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\exp[-0.36(\sqrt{z^2 + 2\mu Y^2} - 35)]}{\sqrt{z^2 + 2\mu Y^2}} dz. \quad (16)$$

For the van der Waals potential $v_1(r)$, we finally have

$$v_2(r) = D(E_0, Y) \left[E_0 - 2 \frac{c_6}{r^6} \right]. \quad (17)$$

Table 1

l	r_{01} (a.u.)	$\delta^{(1)}(l)$	$\delta(l)$
0			-31.01
5			-23.88
10			-17.93
15			-13.03
20			-9.08
25			-6.00
30			-3.79
35	7.8	+1.40	-2.09
40	9.4	+0.623	-1.06
45	10.7	+0.332	-0.47
50	11.9	+0.193	-0.17
55			+0.019
60			+0.041

Values of the quantities r_{01} , $\delta(l)$, and $\delta^{(1)}(l)$ in terms of the orbital quantum number l .

Application to the Na–He system. The case of elastic scattering between He and alkaline atoms Na can be investigated numerically using the above results. For these scattering types, the potential $v_1(r)$ is assumed to be known a priori and is equal to $-c_6r^{-6}$, where c_6 is the van der Waals constant [9], while the potential $v_2(r)$ is then suggested to have the form $v_2(r) = Dr^\beta e^{-\alpha r}$, where the values of the parameters D , β , and α can be found in [10].

In the Fig. 1, we show the results obtained from formula (17) with the original curve $v_2(r) = Dr^\beta e^{-\alpha r}$ for comparison. We note that the discrepancy between the curves is entirely expected and is related to approximation (6), which was previously used to decouple the differential equations. On the other hand, the inner region where $r < 7.80$ cannot be attained by the developed method, because in the framework of the conventional phase-integral method, it corresponds to the classically forbidden domain of motion. In the next section, we show that using an appropriately chosen auxiliary term in the analytical expression for the potential $v(r)$ can make a significant part of this region accessible in many cases.

4. The auxiliary potential

In the preceding section, we calculated the potential $v_2(r)$ by the semiclassical inverse scattering theory and showed that the inner region ($r < 7.80$) is unattainable because it corresponds to the classically forbidden domain of motion. To overcome the indicated difficulties, it is always possible to include an auxiliary potential $v_{\text{aux}}(r)$ that does not violate the applicability conditions for semiclassical approximation for a fixed energy.

Introducing an arbitrary potential $v_{\text{aux}}(r)$, we can rewrite the potential $v(r)$ in the new form

$$v(r) = v_{\text{aux}}(r) + V_2(r), \quad (18)$$

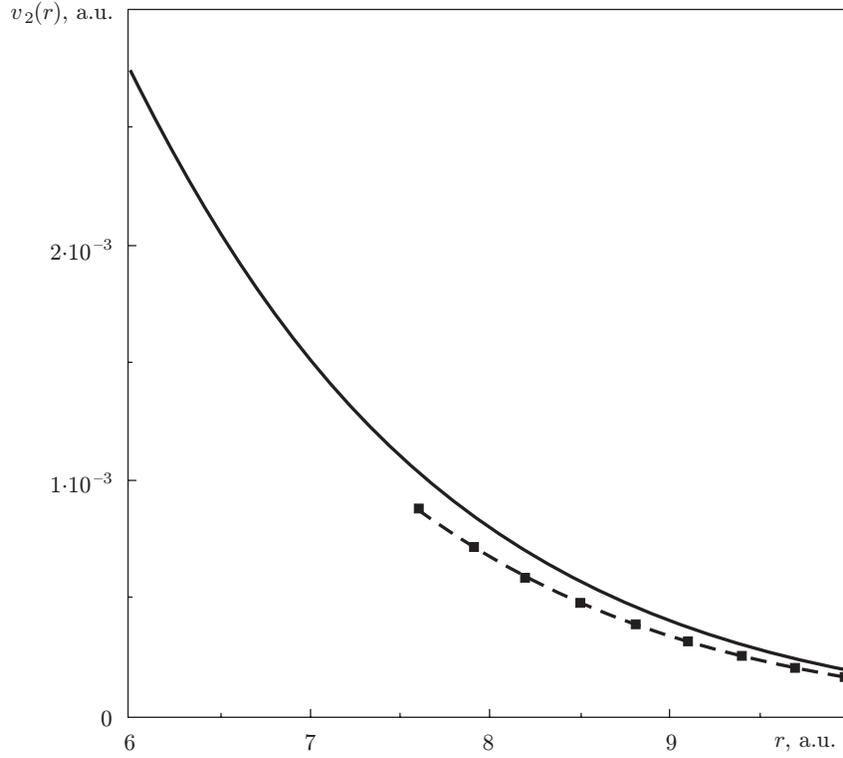


Fig. 1. The potential $v_2(r)$: the solid line is the original formula and the dashed line with squares is the standard approach.

where

$$V_2(r) = v_1(r) + v_2(r) - v_{\text{aux}}(r) \quad (19)$$

(the subscript “aux” indicates that we use an auxiliary potential). We transform these formulas by replacing $v_1(r)$ with $v_{\text{aux}}(r)$ and $v_2(r)$ with $V_2(r)$. The Schrödinger equation then becomes

$$\Delta\Psi + K_{\text{aux}}^2(r)\Psi = 2\mu V_2(r)\Psi, \quad (20)$$

where

$$K_{\text{aux}}^2(r) = 2\mu \left(E_0 - \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} - v_{\text{aux}}(r) \right). \quad (21)$$

Using the specific applicability conditions for the phase-integral method, we write $P_{\text{aux}}(E_0, l)$ as a function of the phase shifts,

$$P_{\text{aux}}(E_0, l) = -\sqrt{\frac{2}{\mu}} [\delta(l) - \delta_{\text{aux}}(l)], \quad (22)$$

$$D_{\text{aux}}(E_0, Y_{\text{aux}}) = -\frac{2}{\pi} \int_Y^\infty \frac{1}{\sqrt{Y_{01\text{aux}}^2 - Y_{\text{aux}}^2}} \frac{dP_{\text{aux}}(E_0, l)}{dY_{01\text{aux}}} dY_{01\text{aux}}, \quad (23)$$

$$D_{\text{aux}}(E_0, Y_{\text{aux}}) = V_2(r) \frac{dr^2}{dY_{\text{aux}}^2}. \quad (24)$$

The potential $V_2(r)$ is now found from (24), $v_2(r)$ is derived from (19), and we have

$$v_2(r) = D_{\text{aux}}(E_0, Y_{\text{aux}}) \left[E_0 - v_{\text{aux}}(r) - \frac{r}{2} \frac{dv_{\text{aux}}(r)}{dr} \right] - v_1(r) + v_{\text{aux}}(r). \quad (25)$$

In the calculations, $dP_{\text{aux}}(E_0, l)/dY_{01\text{aux}}$ is obtained from the function $P_{\text{aux}}(E_0, l)$ by interpolating. Integral (23) is calculated numerically with an enhanced version of a program using the FORTRAN library, and expression (25) allows reconstructing the sought potential.

4.1. Partial phase shift for the auxiliary potential. Phase shifts offer a convenient means for expressing all the essential information required for describing scattering. Hence, the phase shifts $\delta(l)$ completely describe the physical behavior in the scattering problem.

The complete phase shifts for a centrally symmetric potential can be treated using the variable-phase method [11]. We calculate the phase shifts using the standard approach. Thus, if the potential has a compact support and is piecewise uniform, then we can also use the more exact description outlined in [12]. Our arbitrary potential is not a potential from the class described above. It has the form

$$v_{ab} = \frac{a}{r^2} + b,$$

where a and b are two adjustable parameters and the subscript “aux” is replaced with the index ab . Analogously to [13], the analytic expression for the phase shift $\delta_{ab}(l)$ can be obtained in the form

$$\delta_{ab}(l) = \frac{\pi}{2} \left[\sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\mu ab}{E_0}} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + 2\mu a} \right], \quad (26)$$

where we use Kramers’s first-order approximation (the expression $l(l+1)$ is replaced with $(l+1/2)^2$).

Calculating the integral $D_{ab}(E_0, Y)$ allows immediately suggesting two important criteria for choosing the pair of parameters in the potential $v_{ab}(r)$:

1. the classically forbidden domain of motion must be sufficiently reduced, and
2. the applicability condition for the semiclassical approximation must always be satisfied.

4.2. Improvement with respect to the standard case. The interaction of atoms of an alkali metal and a rare gas has been the object of a number of both experimental and theoretical investigations in the last decade. The source of accurate information about such potentials is differential optical collisions [14] and observations leading to the measurement of the refraction index of a given atomic wave transmitted through a medium of rare gas atoms [15]. In the proposed example, we focus on the elastic scattering of the Na–He system.

As an alternative, we could determine more accurate values for the second part of the “alkaline metal–rare gas” interaction potentials, based on the preceding considerations. An analytical approach for reconstructing the potential is established. It is easy to adopt a procedure for a direct numerical solution by varying the pair of parameters until a satisfactory fit to the original potential is obtained. Thus, the main result in this section is an adequate choice of the two relevant dimensionless problem parameters a and b . Our treatment always preserves the applicability conditions for the semiclassical approximation.

The total phase shift for the full potential remains unchanged and can be calculated analytically in terms of $v_1(r)$ and the orbital quantum number l or simply expressed in terms of the experimental data.

We recall that the pair of parameters is chosen to satisfy the applicability condition for the semiclassical approximation

$$\left| \frac{L_a}{[2\mu(E_0 - b)r^2 - L_a]^{3/2}} \right| \ll 1,$$

where $L_a = l^2 + l + 2a\mu$.

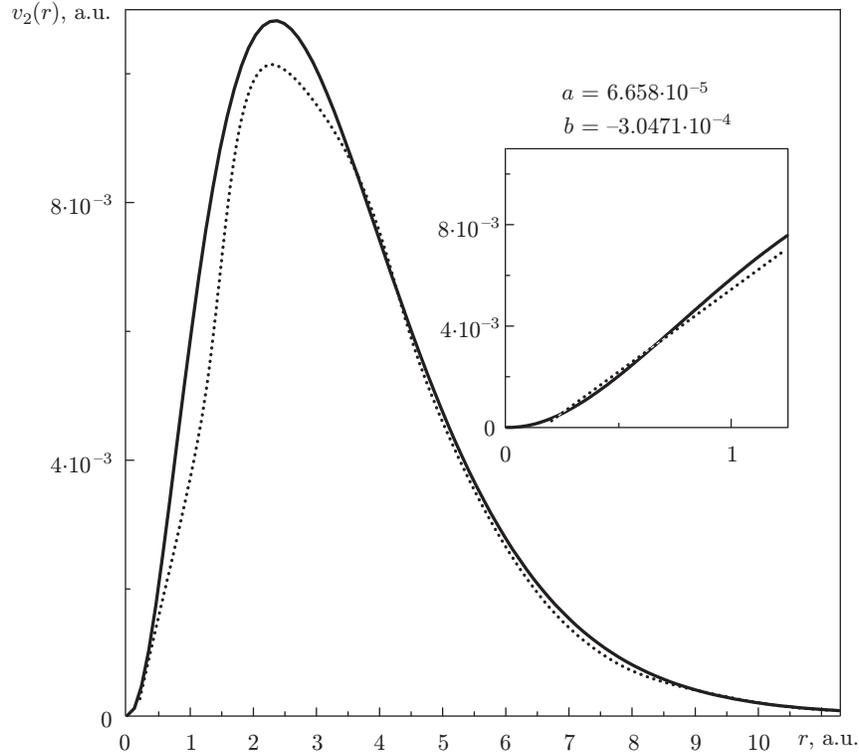


Fig. 2. The potential $v_2(r)$, $0 \leq r \leq 11$ (inset: $0 \leq r \leq 1.25$): the solid line is the original formula and the dotted line is the potential reconstructed using the auxiliary potential with the parameter pair $\{a, b\}_2 = (6.658 \cdot 10^{-5}, -3.0471 \cdot 10^{-4})$, for which the lower boundary for the attainable region is $r = 0.199$.

Knowing the phase shift for the auxiliary and full potentials and the pair of parameters a and b , we can reconstruct the potential; as a function of r , it has the form

$$v_2(r) = (E_0 - b)D_{ab}(E_0, Y) + \frac{c_6}{r^6} + \frac{a}{r^2} + b.$$

5. Discussion and future tasks

We have presented a complete analysis of the problem of reconstructing the potential for the time-independent Schrödinger equation in the formalism of the inverse scattering problem. We formulated a semiclassical approximation method that allows including an arbitrary potential.

We demonstrated the advantage of using the inverse scattering theory together with the phase-integral method by showing that introducing an appropriate auxiliary potential without loss of accuracy reduces the unattainable region (i.e., the region where the potential cannot be reconstructed using the method). The lower boundary of the attainable region (for four pairs of parameter values in the auxiliary potential) lies within a significantly small distance from the point $r = 0.19$. Namely, for the parameter pair values $\{a, b\}_1 = (-0.0024, -0.0012)$, $\{a, b\}_2 = (6.658 \cdot 10^{-5}, -3.0471 \cdot 10^{-4})$, $\{a, b\}_3 = (2 \cdot 10^{-5}, 0.9 \cdot 10^{-3})$, and $\{a, b\}_4 = (-2 \cdot 10^{-4}, 5 \cdot 10^{-5})$, the obtained values for the lower boundary of the attainable region are respectively 0.197, 0.199, 0.208, and 0.478.

In Fig. 2, we present the reconstructed potential (using the second parameter pair considered) and the original potential as functions of r . It is clear that the results are excellent: the curves coincide with a high degree of accuracy. But a small difference between the original potential $v_2(r)$ and our calculations based

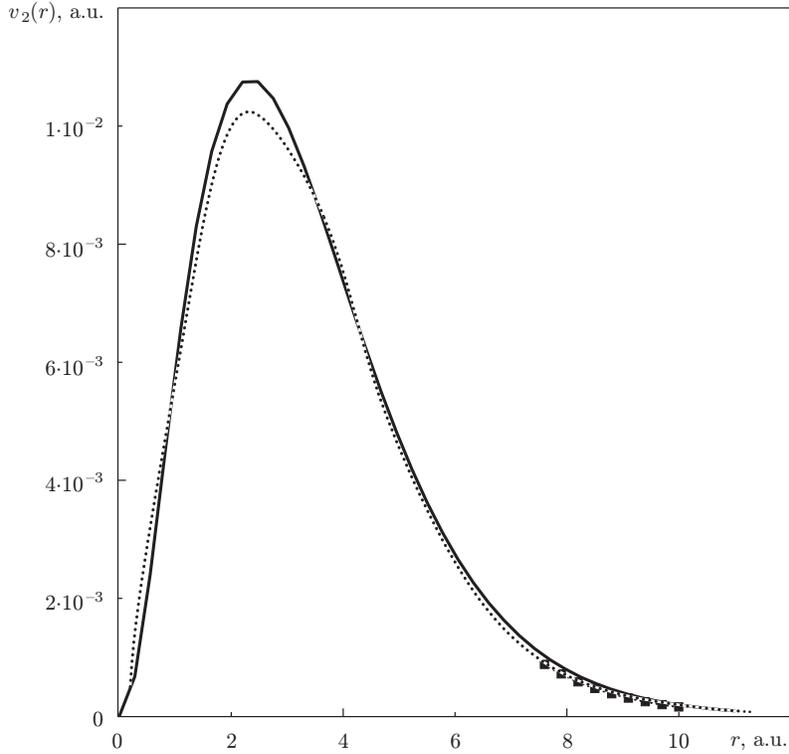


Fig. 3. The potential $v_2(r)$: the solid line is the original formula, the dotted line is the potential reconstructed using the auxiliary potential with the parameter pair $\{a, b\}_1 = (-0.0024, -0.0012)$ (the best choice of the parameter values), and the short broken line with squares is the potential reconstructed using the standard approach. The lower boundary of the attainable region is equal to $r = 7.8$.

on the potential obtained using the inverse scattering theory remains near the maximum. This difference between the curves can be expected; it is related to approximation (6) for decoupling the differential equations.

In Fig. 3 for comparison, we present the potentials $v_2(r)$ reconstructed using the standard approach and the auxiliary potential approach (with the first pair of parameters in this case). We can note two essential points. First, the standard approach yields a result with a partial range, and the result obtained using the auxiliary potential is much more complete. Second, including the free parameters a and b gives a considerable improvement in the procedure for reconstructing the potential. But the relative percent error $(v_{2,\text{original}} - v_{2,\text{inverted}}) \times 100/v_{2,\text{original}}$ is approximately equal to 0.04% in all figures.

In Table 2, we present the results for the integral $D_{ab}(E_0, r)$ and the turning points depending on the orbital quantum number l for the two better parameter pairs.

In the future, we hope to improve the sensitivity of the standard solution by replacing the van der Waals interaction with a nonrelativistic Yukawa-type attractive potential with a specific negative parameter and extract more precise information about the scattering potentials in order to achieve a better reconstruction of the unknown potential within a specified error tolerance. Our main goal is to reproduce the unknown potential as exactly as possible. Other possibilities include modifications of the van der Waals interaction $V(r) = -c_6/r^6$ as given on p. 343 in [16] and on p. 203 in [17].

To conclude, we have presented an attractive approach that allows a highly exact calculation of the sought potential well beyond the limits of applicability of the standard approach. The results show the practical effectiveness of the proposed approach. Finally, we can emphasize that this approach is general

Table 2

l	r_{ab}		$D_{ab}(E_0, r)$	
	$\{a, b\}_1$	$\{a, b\}_2$	$\{a, b\}_1$	$\{a, b\}_2$
0		0.19999		$-2.3566 \cdot 10^8$
5	0.19764	1.24169	$-1.6451 \cdot 10^8$	-4109.3
10	1.6258	2.35591	-526.41	-81.534
15	2.622	3.47191	-25.415	-3.1118
20	3.5685	4.58963	-0.84426	1.9936
25	4.4968	5.70774	1.6654	1.6725
30	5.4163	6.82603	1.5944	1.0107
35	6.3307	7.94444	1.2242	0.6117
40	7.2421	9.06292	0.9234	0.38492
45	8.1514	10.1815	0.72797	0.27275
50	9.0593	11.3000	0.61211	0.22103

Values of the classical turning points r_{ab} ($K_{ab}(r_{ab}) = 0$) and the integral $D_{ab}(E_0, r)$ as a function of the orbital quantum number l for the pairs of parameters $\{a, b\}_1 = (-0.0024, -0.0012)$ and $\{a, b\}_2 = (6.658 \cdot 10^{-5}, -3.0471 \cdot 10^{-4})$. All quantities are in atomic units.

and can be extended and applied to a very wide variety of elastic scattering problems.¹

Acknowledgments. The authors benefited from the stimulating discussions with J. N. Foester, A. F. Ardowitz, and Professor R. D. Smith. The authors thank S. Abral for the help with implementing the numerical calculations.

This work was supported in part by the Academy of Sciences of the Constantine University (Contract No. D0701/01/04).

REFERENCES

1. M. Dzugasov, K.-E. Larsson, and I. Ebbsjö, *Phys. Rev. A*, **38**, 3609 (1988); D. Levesque, J.-J. Weis, and L. Reatto, *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 451 (1985); M. W. C. Dharma-wardana, and G. C. Aers, *Phys. Rev. Lett.*, **56**, 1211 (1986); L. Reatto, D. Levesque, and J.-J. Weis, *Phys. Rev. A*, **33**, 3451 (1986); M. C. Bellissent-Funel, P. Chieux, D. Levesque, and J.-J. Weis, *Phys. Rev. A*, **39**, 6310 (1989); G. Kahl and M. Kristufek, *Phys. Rev. E*, **49**, R3568 (1994); G. Kahl, B. Bildstein, and Y. Rosenfeld, *Phys. Rev. E*, **54**, 5391 (1996).
2. J. Goodisman, *Diatom Interaction Potential Theory*, Vol. 2, Acad. Press, New York (1973); A. Dalgarno, "New methods for calculating long-range intermolecular forces," in: *Intermolecular Forces* (Adv. Chem. Phys., Vol. 12, J. O. Hirschfelder, ed.), Wiley, New York (1967), p. 143.
3. K. Chadan and P. Sabatier, *Inverse Problems in Quantum Scattering Theory*, Springer, New York (1989); R. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles* (2nd ed.), Springer, New York (1982).
4. R. Rydberg, *Z. Phys.*, **73**, 376 (1932); O. Klein, *Z. Phys.*, **76**, 226 (1932); A. L. G. Rees, *Proc. Phys. Soc. London*, **59**, 998 (1947); J. A. Wheeler, "Analysis illuminating the connection between potential and bound states and

¹In our next paper (not yet completed), we apply our approach to very reliable results from an experiment with scattering on krypton (Kr). We thus compare the reconstructed potential with the Lennard-Jones potential with the parameterization usually chosen for krypton and with the Aziz-Slaman potential (see the excellent work in [18] relative to the Rosen-Morse potentials).

- scattering,” in: *Studies in Mathematical Physics* (E. H. Lieb, B. Simon, and A. S. Wightman, eds.), Princeton Univ. Press, Princeton (1976), p. 351; M. W. Cole and R. H. Good Jr., *Phys. Rev. A*, **18**, 1085 (1978); N. Froman and P. O. Froman, *Int. J. Quant. Chem.*, **35**, 751 (1989).
5. R. F. Cameron and S. McKee, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, **19**, 1527 (1983); X. C. Cao, “On the JWKB approximation in the case of a multicomponent potential,” International Report No. IC/78/140, ICTP, Trieste (1978); W. H. Miller, *J. Chem. Phys.*, **51**, 3631 (1969).
 6. L. Schiff, *Quantum Mechanics* (3rd ed.), McGraw-Hill, New York (1968).
 7. P. O. Froman, *The JWKB Approximation*, North-Holland, Amsterdam (1965).
 8. U. Buck, *J. Chem. Phys.*, **54**, 1923 (1977).
 9. G. D. Mahan, *J. Chem. Phys.*, **80**, 2755 (1969).
 10. E. Roueff, *J. Phys. B*, **7**, 185 (1974).
 11. F. Calogero, *Variable Phase Approach to Potential Scattering*, Acad. Press, New York (1967).
 12. R. Airapetyan, A. G. Ramm, and A. B. Smirnova, *Phys. Lett. A*, **254**, 141 (1999).
 13. X. C. Cao and M. N. Tran, “JWKB approximation for the singular potential,” Internal Report No. 22, Observatoire de Paris Meudon, Paris (1976).
 14. J. Grosser, V. Hoffmann, and F. Rebenrost, *J. Phys. B*, **33**, L577 (2000).
 15. J. Vigné, *Phys. Rev. A*, **52**, 3973 (1995).
 16. W. B. Russel, D. A. Saville, and W. R. Schowalter, *Colloidal Dispersions*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1989).
 17. J. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces* (2nd ed.), Acad. Press, London (1992).
 18. F. Bocchi, P. Chieux, R. Magli, L. Reatto, and M. Tau, *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 947 (1993); *J. Phys., Condens. Matter*, **5**, 4299 (1993); J.-P. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids* (2nd ed.), Acad. Press, London (1986); R. A. Aziz and M. J. Slaman, *Mol. Phys.*, **58**, 679 (1986); N. Dalarsson, *Fiz. B*, **3**, 147 (1994).

عالجنا في خطوة أولى الطاقات والحالات المرتبطة الموافقة لأنظمة كمون من النوع : $V(r) = ar^2 + br^{-4} + cr^{-6}$ وذلك بإدخال الكمون الفائق المقترح حسب المكنيك الكمية للتناظر الفائق. اعتمدنا في الخطوة الثانية على الطرح المعاكس الذي قمنا بوضعه خصيصا لمعادلة شرودنجر في إطار حالات الانتشار, وهذا باستعمال طريقة الطور-التكامل. وبالتالي تمكنا من الحصول على شكل الكمون بين الذرات القلوية-الغاز الخامل بتوافق ممتاز. النتائج المتحصل عليها في كلتا الجزئين من هذا العمل كانت جد مرضية.

Abstract

We treated in a first stage, the energies and corresponding bound states for the systems of potential of the type $V(r) = ar^2 + br^{-4} + cr^{-6}$ by introducing the superpotential suggested by the SUSYQM.

In the second stage, an opposite problem is formulated for the equation of Schrödinger within the framework of the states of diffusion by using the method “*phase integral*”. Thus the potential between atoms *rare alkaline-gas* was exactly identified and reproduced.

Results very satisfactory were obtained for both parts of this work.

Résumé

Nous avons traité dans une première étape, les énergies et les états liés correspondants pour les systèmes de potentiel du type $V(r) = ar^2 + br^{-4} + cr^{-6}$ en introduisant le superpotentiel suggéré par la MQSUSY.

Dans la seconde étape, un problème inverse est formulé pour l'équation de Schrödinger dans le cadre des états de diffusion en utilisant la méthode « *phase-intégrale* ». Ainsi le potentiel entre atomes *alcalin-gaz rare* a été exactement identifié et reproduit.

Des résultats très satisfaisants ont été obtenus pour les deux parties de ce travail.