



République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Med Khider Biskra

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

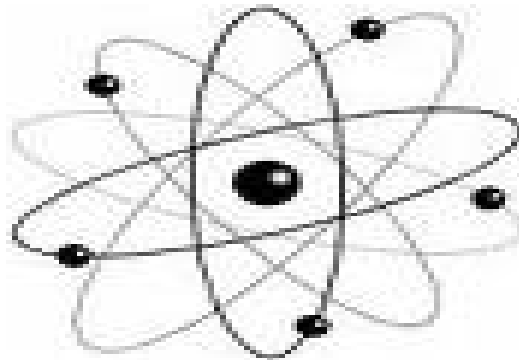


Département des Sciences de la Matière

Domaine des Sciences de la Matière

Filière de Physique

Spécialité Physique des Matériaux



Mémoire de fin d'étude en Master

Intitulé :

**Modélisation numérique pour générer
l'énergie de l'état lié d'un système quantique par
approche B-spline**

Présenté par:

Belkacemi sara

Devant le Jury Composé par :

Boudib ouahiba

M.A. « A »

Université Med Khider- Biskra

Président

Haif Khaif Ouanassa

M.C. « D »

Université Med Khider- Biskra

Rapporteur

Guergueb saida

M.A. « A »

Université Med Khider - Biskra

Examineur

Année Universitaire

2018-2019

Remerciements

Premièrement, je remercie **ALLAH** le tout puissant de m'avoir accordé la volonté et courage pour réaliser ma mémoire.

Je tiens à remercier mon encadreur madame **Haif Khaif Ouanassa** maitre de conférence B à l'université de Biskra qu'a dirigé ce mémoire, pour son assistante et son suivi tout au long de cette étude.

Mes remerciements vont également à tous les membres Du jury et à tous ceux qui ont participé de près ou De loin à l'élaboration de notre mémoire.

Je tiens vivement à exprimer mes remerciements à tous mes camarades pour l'aide précieuse qu'elle n'a cessé de m'apporter tout le long de ce travail à travers ses conseils et son soutien.

À la fin de ce travail j'ai réalisé que j'ai pu l'accomplir grâce à la contribution d'un grand nombre de personnes, et quoi que je dise, je ne pourrais jamais tous autant les remercier.

Dédicaces

A mon cher père et ma chère mère

« Dieu vous protège »

A me chers frères

A tous mes oncles et tantes

A tous mes proches

A tous mes amis

A tous ce que j'aime

Ce mémoire leur est dédiée

Belkacemi sara

Table des matières

Remerciement	
Dédicaces	
Introduction générale	01
Chapitre 1 : Calcul Variationnels	
I-1 Introduction	02
I-2 le calcul des variation.....	03
I-2-1 Equation d'Euler-Lagrange	03
I-2-2 Démonstration De l'équation d'Euler Lagrange	04
I-2-3 Formule de Beltrami	06
I-3 Quelques Exemples	06
I-3-1 le principe de Fermat de moindre instant	06
I-3-2 Géodésiques	08
I-3-3 Le Brachistochrone	09
Chapitre 2: Equation de Schrödinger	
II-1 Introduction	11
II-2 Equation de Schrödinger stationnaire	11
II-3 Equation de Schrödinger indépendante du temps	12
II-3-1 Formulation	12
II-3-2 La fonction d'onde	14
II-4 Equation de Schrödinger dans un potentiel central	15
II-4-1 Hamiltonien quantique	15
II-4-2 Séparation de variable	17
II-4-3 Equation radiale	18
II-4-3-1 Comportement l'origine des solutions ($r \rightarrow 0$)	19
II-4-3-2 Comportement asymptotique ($r \rightarrow \infty$)	20
Chapitre 3: La Méthode Variationnelle Semi -Inverse- B-Spline	
III-1 Introduction	21
III-2 Présentation de la méthode b-spline	21
III-3 Formulation de la méthode variationnelle semi inverse-b-Spline	24
III-3-1 Applications numériques	26

III-3-2 Représentations graphiques	30
Conclusion générale	38
Référence	39

Introduction Générale

La “mécanique quantique” a été inventée (entre 1925 et 1930) pour les besoins de la cause c’est-à-dire pour comprendre et expliquer les phénomènes observés à l’échelle atomique, la stabilité des atomes et le caractère discret des spectres atomiques sont des phénomènes radicalement en contradiction avec les lois de la physique de Newton et de Maxwell. Le cadre conceptuel de la physique quantique est, a plus d’un titre, révolutionnaire et joue aujourd’hui encore un rôle essentiel dans notre compréhension de la structure de la matière [1]. La mécanique quantique constitue un changement révolutionnaire dans notre compréhension du monde microscopique. Elle remet en cause sévèrement la validité des lois classiques et se pose en théorie alternative à la mécanique classique tout en l’englobant et en possédant un spectre d’application plus large[2].

La résolution de l’équation Schrödinger se simplifie considérablement et ses solutions permettent d’avoir une vision simple de problèmes physiques réels dont la résolution exacte est complexe et élaborée [3].

On montre que la méthode semi inverse est un outil puissant pour chercher les principes variationnels pour des problèmes physiques linéaires directement à partir des équations de champ sans utiliser multiplicateur de Lagrange [4,5].

Ce travail se divise en trois chapitres qui sont organisés comme suit :

Dans le premier chapitre, nous discutons les notions essentielles de l’aspect variationnels parce que La plupart des problèmes de la physique ne peuvent être résolus exactement, et donc ont besoin d’être traités approximativement. Il existe des méthodes couramment utilisées dans la mécanique quantique: telle que la méthode variationnelle et aussi nous avons présenté l’équation d’Euler et Lagrange.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons l’équation de Schrödinger stationnaire dans un potentiel central, pour l’étude d’un système physique.

Le troisième chapitre, nous appliquons la méthode variationnelle semi inverse-B-Spline pour un type de potentiel et qui concerne le cas de coulomb, pour trouver les énergies et les états correspondants E et $R(r)$ respectivement.

Chapitre I :

Calcul Variationnels

I-1 Introduction

La résolution des équations se ramène à la recherche de géodésiques dans un espace approprié (en général l'espace des états du système physique étudié), sachant que ces géodésiques sont les extrémales d'une certaine intégrale représentant la longueur de l'arc joignant les points fixes dans cet espace abstrait. Les équations d'Euler-Lagrange sont l'archétype des méthodes utilisées pour résoudre les équations dans ce cadre, Pour cette raison, nous allons discuter dans ce chapitre l'équation Euler et de Lagrange [6].

La technique que nous allons donner est d'une importance centrale dans la théorie de la dynamique, et plus généralement, pour trouver l'équation du mouvement pour plusieurs systèmes physiques, un exemple classique est donné par le problème de brachistochrone de Jean Bernoulli. Nous envisageons une particule, déplacée par une distance horizontale, et une distance verticale d'un point particulier A . Nous supposons la particule commence à l'origine O . Le problème qui se pose est alors: sur quel chemin de O à un point donné A sera une particule (au repos à l' O), sous la gravité, et sans friction, dans moins de temps [7].

Commençons l'écriture de l'énergie de la particule, à tout instant, comme suivant [8]:

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

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

$$\begin{aligned} T &= \int_0^t dt \\ &= \int \frac{ds}{v} \\ &= \int_0^a \frac{(1 + y'^2)^{1/2}}{(2gy)^{1/2}} \end{aligned} \quad (\text{I} - 2)$$

T est une fonctionnelle de la trajectoire $y(x)$ en question et a l'abscisse de A . Nous écrivons $T[y(x)]$, et une fois $y(x)$ est donnée nous pouvons calculer $T[y]$. La

question est quelle y minimisant T [9]. Nous allons formuler ce problème comme un exemple d'une classe plus générale des problèmes de calcul variationnel [10].

I-2 Le Calcul Des variations

Le calcul des variations est une des branches classiques des mathématiques. De nombreux mathématiciens exceptionnels, Lagrange ou Hilbert pour ne citer que les plus célèbres, ont contribué à son développement. Le calcul de variations peut se révéler utile à la physique, à l'ingénierie, à la biologie ou encore à l'économie, mais bien naturellement aussi à d'autres branches des mathématiques telle que la géométrie ou bien l'étude des équations différentielles [11].

Le problème posé, c'est-à-dire trouver une fonction, ou une famille de fonctions, qui minimise un certaine intégrale, s'appelle le calcul des variations ou le calcul variationnel. On le doit à Euler qui en avait compris le fonctionnement et à Lagrange qui fit d'importantes contributions [12].

I-2-1 Equation d'Euler-Lagrange

Avant de donner la définition générale d'un problème variationnel lagrangien, on décrit deux exemples, la recherche des plus courts chemins sur une surface, et le principe de Fermat en optique géométrique. Une fois obtenues les équations qui caractérisent les extrémals, on reconnaîtra la nature variationnelle des équations de la dynamique pour une particule dans un champ de potentiel (principe de moindre action de Hamilton) [13].

Notion de fonctionnelle

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

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

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

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

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

$$S(y) = \int_{x_1}^{x_2} f(y(x), y'(x), x) dx \quad (\text{I} - 4)$$

La fonctionnelle $S[y]$ est donc un nombre qui dépend de la fonction $y(x)$. L'approche variationnelle va nous permettre de déterminer la fonction $y(x)$ telle que $S[y]$ soit stationnaire (extrémale), sachant que $y(x_1)$ et $y(x_2)$ sont donnés.

Nous allons montrer que la fonction $y(x)$ qui remplit cette condition doit vérifier l'équation d'Euler-Lagrange [14] :

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

I-2-2 Démonstration de L'équation d'Euler-Lagrange

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

$$y(x) = y_0 + \eta(x) \quad (\text{I} - 6)$$

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

$$\delta S = \int_{x_1}^{x_2} [f(y_0(x) + \eta(x), y'_0(x) + \eta'(x), x) - f(y_0(x), y'_0(x), x)] dx \quad (I-7)$$

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

$$f(y_0(x) + \eta(x), y'_0(x) + \eta'(x), x) \simeq f(y_0(x), y'_0(x), x) + \frac{\partial f}{\partial y} \eta(x) + \frac{\partial f}{\partial y'} \eta'(x) \quad (I-8)$$

Donc :

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

En intégrant par parties la seconde intégrale, on obtient :

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

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

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

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

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

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

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

En général, les équations d'Euler-Lagrange conduisent à une équation différentielle ordinaire non linéaire du second ordre. Ceci est généralement très difficile à résoudre directement. Cependant, nous savons qu'il peut y avoir un certain nombre de simplifications possibles [15].

I-2-3 Formule de Beltrami

Si la fonction f ne dépend pas explicitement de la variable x , ($\frac{\partial f}{\partial x} = 0$), on obtient la formule de Beltrami :

$$f - y' \frac{\partial f}{\partial y'} = C \quad (\text{I} - 14)$$

Où C est une constante.

Démonstration :

Calculons :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left[f - y' \frac{\partial f}{\partial y'} \right] &= \frac{\partial f}{\partial y} y' + \frac{\partial f}{\partial y'} y'' - y' \left[\frac{\partial^2 f}{\partial y' \partial y} y' + \frac{\partial^2 f}{\partial y'^2} y'' \right] \\ &= y' \left[\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\partial^2 f}{\partial y' \partial y} y' - \frac{\partial^2 f}{\partial y'^2} y'' \right] \end{aligned} \quad (\text{I} - 15)$$

D'après l'équation d'Euler, le terme entre crochets est nul, ce qui démontre la formule [16].

I-3 Quelques Exemples

Voyons comment tout cela fonctionne avec certains exemples physiques concrets

I-3-1 Le Principe de Fermat de Moindre Instant

Le principe de Fermat est un principe physique qui décrit la propagation des rayons lumineux. En 1657, Pierre de Fermat propose une approche plus abstraite, basée sur l'idée que "La nature agit toujours par les voies les plus courtes et les plus simples".

Le principe de Fermat s'énonce comme un principe de moindre de temps, et peut s'exprimer ainsi :

"Cet état montre qu'un rayon de lumière entre deux points fixes dans un milieu se déplaçant le long d'un chemin, il peut traverser dans un minimum de temps".

L'indice de réfraction, dans le milieu est relié à la vitesse de la lumière par :

$$n = \frac{1}{c} \quad (\text{I} - 16)$$

Pour trouver le chemin, nous minimisons :

$$T = \int dt = \int \frac{ds}{c} = \int n ds \quad (\text{I} - 17)$$

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

$$T = \int \sqrt{1 + y'^2} n(x, y) dx \quad (\text{I} - 18)$$

Pour n indépendante de y , l'intégrale première donne :

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

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

$$y' = \text{const} \quad (\text{I} - 19)$$

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

$$y' = \frac{y'}{\sqrt{1 + y'^2}} = \text{const} \quad (\text{I} - 20)$$

En on aura entre deux milieux, la relation:

$$K = n_1 \sin \theta_1 = n_2 \cos \theta_2 \quad (\text{I} - 21)$$

Qui est la loi de Snell.

I-3-2 Géodésiques

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

$$S = \int ds \quad (\text{I} - 22)$$

Où :

$$ds^2 = d\theta^2 + \sin^2(\theta) d\phi \quad (\text{I} - 23)$$

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

$$S = \int d\theta F(\theta, \phi, \phi') \quad (\text{I} - 24)$$

Avec :

$$F = \sqrt{1 + \sin^2(\theta)\phi'^2} \quad (\text{I} - 25)$$

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

$$\frac{\sin^2(\theta)\phi'}{\sqrt{1 + \sin^2(\theta)\phi'^2}} = K \quad (\text{I} - 26)$$

Est une constante. Cette équation donne le chemin du grand cercle [17].

I-3-3 Le Brachistochrone

Historiquement le problème prototype qui a introduit le calcul des variations est un des problèmes les plus connus de l'histoire des mathématiques, *le problème Brachistochrone* : trouver la courbe le long de laquelle une particule soumise à un champ de pesanteur uniforme glisserait d'un point $a(0,0)$ à un point $b(x_b, y_b)$ en un minimum de temps. Ce problème a été posé par Jean Bernoulli en 1696 comme un challenge pour les mathématiciens de son époque. La solution fut trouvée par Jean Bernoulli lui-même ainsi que par son frère Jacques Bernoulli, Newton, Leibniz et l'Hôpital [18].

La fonctionnelle en question est :

$$\sqrt{2gT} = \int_0^a dx F(y, y') \quad (\text{I} - 27)$$

Avec :

$$F(y, y') = \sqrt{\frac{1 + y'^2}{y}} \quad (\text{I} - 28)$$

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

$$\sqrt{\frac{1 + y'^2}{y}} - y' \frac{1}{\sqrt{y'}} \frac{y'}{\sqrt{1 + y'^2}} = K \quad (\text{I} - 29)$$

où K est une constante. Ceci implique que :

$$y' = \sqrt{\frac{2c}{y} - 1} \quad (\text{I} - 30)$$

Avec $2c = 1 - K^2$. Nous résolvons ceci de manière paramétrique, en posant :

$$y = 2c \sin^2 \theta$$

$$= c(1 - \cos 2\theta) \quad (\text{I} - 31)$$

Tel que $\theta = 0$ à l'origine.

Alors :

$$\begin{aligned} x &= \int \frac{\sqrt{2c} \sin \theta}{\sqrt{2c} \cos \theta} 2c \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) d\theta \\ &= c \int d\theta (1 - \cos \theta) \\ &= c \left(\theta - \frac{1}{2} \sin 2\theta \right) \end{aligned} \quad (\text{I} - 32)$$

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

Chapitre II :
Equation
De Schrödinger

II-1 Introduction

La résolution de l'équation générale de Schrödinger sans l'observable temps permet l'obtention d'une solution à la fonction d'onde et une évaluation de l'énergie correspondante. Cette manipulation s'exprime directement par l'introduction d'un potentiel décrivant une situation physique donnée. Particularisée par le cas des états liés, l'équation différentielle peut alors fournir des résultats discrets pour l'énergie et une fonction d'onde normalisable. La résolution numérique de l'équation de Schrödinger par sa transformation en un système d'équation linéaire à coefficients constants a permis la réalisation de modèles mathématiques aussi bien dans le cas des systèmes à potentiel simple que dans le cas de ceux de forme quelconque et compliquée. Par des simplifications adéquates, l'équation de Schrödinger a été également appliquée avec succès à la détermination de nombreux cas supposés jusqu'ici difficilement gérables [19].

Le problème fondamental de la mécanique quantique de l'atome est celui du mouvement de l'électron dans un champ d'attraction central.

Dans ce chapitre, nous introduisons l'équation de Schrödinger stationnaire d'une particule dans un potentiel central.

II-2 Equation de Schrödinger stationnaire

En générale l'équation de Schrödinger d'un système quantique est donnée par [20] :

$$H \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (\text{II} - 1)$$

Les fonctions d'ondes Ψ qui porte le nom des fonctions propres qui sont les solutions de l'équation (II - 1) sont données par :

$$\Psi = \Psi_0 e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \quad (\text{II} - 2)$$

Où Ψ_0 est l'amplitude

Pour des états stationnaires, **IE** indépendant du temps, l'équation de Schrödinger se simplifie en l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$H \Psi(r) = E \Psi(r) \quad (\text{II} - 3)$$

Où E est l'énergie totale du système qui porte le nom des valeurs propres.

L'opérateur H est un opérateur nommé Hamiltonien, c'est l'opérateur quantique pour l'énergie totale du système :

$$H = E_c + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \quad (\text{II} - 4)$$

II-3 Equation De Schrödinger Indépendante Du Temps

II-3-1 Formulation

En mécanique classique, l'équation d'onde de fréquence ν et de longueur d'onde λ se déplaçant suivant la direction x associée au mouvement d'une particule est donnée par:

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 \exp \left[2\pi i \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \right] \quad (\text{II} - 5)$$

Où : $\Psi(x, t)$ est la fonction d'onde et Ψ_0 son amplitude

Qui dépend des coordonnées (x, y, z) et du temps t de la particule. Si le système est indépendant du temps, la fonction d'onde peut réduire à :

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 \exp \left(2\pi i \frac{x}{\lambda} \right) \quad (\text{II} - 6)$$

Calculons : $\frac{d\Psi}{dx}$ et $\frac{d^2\Psi}{dx^2}$

Donc :

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = \frac{2\pi i}{\lambda} \Psi(x) \quad (\text{II} - 7)$$

Et :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \left(\frac{2\pi i}{\lambda} \right)^2 \Psi(x) \quad (\text{II} - 8)$$

D'après la relation fondamentale de Louis de Broglie, qui attache à toute particule possédant la quantité de mouvement $p = mv$, une onde de longueur d'onde est égale :

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

(II – 8) S'écrit :

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -4\frac{\pi p^2}{h^2}\Psi(x) \quad (\text{II} - 9)$$

On aura donc :

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{4p^2}{h^2}\right)\Psi = 0 \quad (\text{II} - 10)$$

D'autre part, on a :

$$mv^2 = 2E_c = 2(E - V) \quad (\text{II} - 11)$$

Et : $E_c = \frac{1}{2}mv^2$ et $p = mv$

Où :

E_c : L'énergie cinétique de la particule de masse m et de vitesse v .

E : L'énergie totale du système.

V : L'énergie potentielle.

En tenant compte de ces relations, l'équation (II – 10) s'écrit :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}(E - V)\Psi = 0 \quad (\text{II} - 12)$$

Ou encore :

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2m}\frac{d^2}{dx^2} + V\right)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (\text{II} - 13)$$

(II – 13) Est une équation différentielle d'une particule de masse m se déplaçant dans un espace à trois dimensions en coordonnées cartésiennes. et qui constitue l'équation de Schrödinger. Elle s'écrit la plupart du temps, tout simplement sous la forme :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right) \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (\text{II} - 14)$$

On suppose l'énergie potentielle $V(x)$ est indépendante du temps.

Où $\Delta\psi$ est le laplacien de la fonction ψ .

L'équation de Schrödinger est une équation différentielle qui n'a de solution que pour certaines valeurs de E les valeurs permises de l'énergie portent le nom de "valeurs propres", et les solutions ψ qui leur correspondent portent le nom de "fonctions propres".

On peut retenir la forme abrégée de l'équation :

$$H\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (\text{II} - 15)$$

Où :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$$

H : Désigne l'opérateur Hamiltonien [21].

II-3-2 La Fonction d'onde :

Considérons une particule quantique qui se déplace sur une droite. Si l'on fait une mesure de la position de la particule, la densité de probabilité de trouver la particule à l'endroit x au temps t est donnée par le module au carré d'une amplitude de probabilité complexe $\psi(x, t)$ [22] :

$$P(r, t) = |\Psi(r, t)|^2 \quad (\text{II} - 16)$$

La probabilité de présence dans un volume dv au voisinage de ce point est :

$$dP = \Psi^2(r, t)dv \quad (\text{II} - 17)$$

Comme la probabilité de présence du corpuscule dans tout l'espace est de 1, on doit avoir :

$$\iiint \Psi^2(r, t)dv = 1 \quad (\text{II} - 18)$$

C'est la condition de normalisation de la fonction d'onde.

II-4 Equation de Schrödinger 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 [23].

II-4-1 Hamiltonien Quantique

En mécanique quantique, on cherche à résoudre l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien H , observable associée à l'énergie totale [24].

Cette équation s'écrit en représentation $\{|r\rangle\}$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \Psi(r) = E\Psi(r) \quad (\text{II} - 19)$$

Comme le potentiel V ne dépend que de la distance r de la particule à l'origine des coordonnées, est invariant pour toute rotation et nous dirons que ce mouvement possède la symétrie sphérique, est décrit par l'équation de Schrödinger de la forme [25] :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\pi^2m} \Delta + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi) \quad (\text{II} - 20)$$

Qu'on peut représenter Δ en coordonnées sphériques, à la place des coordonnées cartésiennes.

On encore : $\Delta(x, y, z) \rightarrow \Delta(r, \theta, \varphi)$ avec les coordonnées sphériques :

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad \text{Ou` :} \quad \begin{cases} 0 \leq r \leq \infty; \\ 0 \leq \theta \leq \pi \\ \text{et} \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi \end{cases}$$

Le laplacien Δ prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{II} - 21)$$

Le moment cinétique orbital a pour forme :

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (\text{II} - 22)$$

Ou L^2 est le moment cinétique orbital.

L'expression (II - 22) est tiré a partir du passage en coordonnées polaires, l'expression de L comme vecteur dans la base $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$

$$L_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$L_y = -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \varphi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Ainsi Δ est exprimé en terme de L par la relation :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \quad (\text{II} - 23)$$

Il suffit alors de comparer l'expression (II - 21) à celle de l'opérateur L^2 pour voir que l'hamiltonien quantique H :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2mr^2} L^2 + V(r) \quad (\text{II} - 24)$$

Etre mis sous une forme tout à fait analogue à :

$$H = \frac{P_r^2}{2m} + \frac{1}{2mr^2} L^2 + V(r) \quad (\text{II} - 25)$$

P_r est le moment conjugué de r .

II-4-2 Séparation des variable

Ψ Peut être mise sous la forme :

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$$

Avec :

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

D'où :

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi) \quad (\text{II} - 26)$$

Avec :

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

Les $y_l^m(\theta, \varphi)$ sont normés les harmoniques sphériques.

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

Il suffira donc de normaliser séparément (r) .

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

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

$$L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l + 1) y_l^m(\theta, \varphi) \quad (\text{II} - 27)$$

Ainsi l'équation de Schrödinger prend la forme suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l + 1)}{r^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r) \quad (\text{II} - 28)$$

II-4-3 Equation Radiale

L'équation radiale est donnée par la relation (II - 28), Nous réécrivons sous la forme [26]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l + 1)}{r^2} + V(r) \right] R_{n,l}(r) = E_{n,l} R(r) \quad (\text{II} - 29)$$

Maintenant posons $S_{n,l}(r) = rR_{n,l}(r)$, (les indices n et l sont les nombres quantiques, sont introduits dans la fonction $R(r)$ et dans l'énergie E) et en multipliant les deux membres de l'équation (II - 29) par r , on obtient pour $S_{n,l}(r)$ l'équation différentielle suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] S_{n,l}(r) = E_{n,l} S(r) \quad (\text{II} - 30)$$

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

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \quad (\text{II} - 31)$$

II-4-3-1 Comportement L'origine Des Solutions ($r \rightarrow 0$) :

On suppose que le potentiel $V(r)$ reste fini pour r tendant vers 0; ou au moins ne tend pas vers l'infini plus rapidement que $\frac{1}{r}$, et $V(r)$ vérifie la condition suivante [27] :

$\lim_{r \rightarrow 0} V(r) r^2 = 0 \Rightarrow V(r \rightarrow 0) = \frac{1}{r^\alpha}; \alpha < 2$. Considérant une solution de l'équation, et supposant qu'elle se comporte l'origine comme r^v .

$$S_{n,l}(r)_{r \rightarrow 0} = cr^v \quad (\text{II} - 32)$$

Et en égalant à zéro le coefficient du terme dominant, on obtient la relation :

$$v(v+1) + l(l+1) = 0 \text{ et donc : } v = l, v = l+1.$$

Pour une valeur $E_{n,l}$, on a deux solutions linéairement indépendantes.

Les solutions acceptables de l'équation s'annulent l'origine quel que soit l , puisque :

$$S_{n,l}(r)_{r \rightarrow 0} = cr^{l+1} \quad (\text{II} - 33)$$

Conséquemment, il faut ajouter l'équation la condition :

$$S_{n,l}(0) = 0 \quad (\text{II} - 34)$$

II-4-3-2 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 (II-30) se réduit à [28]:

$$\frac{d^2}{dr^2} S_{n,l}(r) + K^2 S_{n,l}(r)_{r \rightarrow \infty} \simeq 0 \quad (\text{II} - 35)$$

Ou $K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ 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 :

$$\text{Si} \quad E_{n,l} < 0 \quad : \quad S_{n,l}(r)_{r \rightarrow \infty} \sim \exp(-Kr) \text{ ou } K = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (\text{II} - 36)$$

$$\text{Si} \quad E_{n,l} > 0 \quad : \quad S_{n,l}(r)_{r \rightarrow \infty} \sim A \exp(iKr) + B \exp(-iKr)$$

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

Chapitre III :
La Méthode
Variationnelle Semi -
Inverse- B-Spline

III-1 Introduction

Dans ce chapitre on va présenter les résultats des états liés de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Coulomb. Nous utilisons la méthode variationnelle semi inverse avec des bases B-spline.

III-2 Présentation de la méthode B-Spline

Les fonctions B-splines ont été évoluées avec succès dans les principales disciplines de la mécanique quantiques, des solides et nucléaires et de la physique atomique et moléculaire. Les fonctions B-splines fournissent une base raisonnable et cohérente et peut offrir une très grande précision pour la construction de multiple variétés de problèmes numériques. Les fonctions B-splines constituent un ensemble complet de fonctions de base qui vont rapprocher des fonctions données dans le domaine d'intérêt [29].

Les B-splines sont des polynômes définis sur des séquences d'intervalles appropriées [30-33]. Les polynômes ont la caractéristique d'être nuls partout sauf sur une séquence précise d'intervalle [34].

On prend un ensemble de points x_k , qui sont appelés nœuds. Les splines d'ordre k (degré $k - 1$) sont des fonctions définies dans les intervalles $x_i < x < x_{i+k}$, et une formule de récurrence est donnée par l'expression:

$$B_{i,k}(r) = \frac{r - r_i}{r_{i+k-1} - r_i} B_{i,k-1}(r) + \frac{r_{i+k} - r}{r_{i+k} - r_{i+1}} B_{i+1,k-1}(r) \quad (\text{III} - 1)$$

Ou $i = 1, 2, 3, \dots$

En tenant compte de la condition initiale,

$$B_{i,1}(x) = \begin{cases} 1, & t_i \leq r < t_{i+1} \\ 0, & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{III} - 2)$$

On peut représenter les fonctions B-spline d'ordre 3, 4, 5 et 7 comme dans les tableaux 1, 2, 3 et 4 respectivement.

Tableau.III.1 Fonctions B-spline, ordre 3

Les fonctions B-spline d'ordre ,3	Intervalle de x
$X_i = \frac{1}{6h^3}(x - x_i)^3$	$x_i \leq x < x_{i+1}$
$Y_i = -\frac{3}{2} + \frac{3}{h}(x - x_i) - \frac{1}{h^2}(x - x_i)^2$	$x_{i+1} \leq x < x_{i+2}$
$Z_i = \frac{1}{2h^2}(x_{i+3} - x)^2$	$x_{i+2} \leq x < x_{i+3}$

Tableau.III.2 Fonctions B-spline, ordre 4

Les fonctions B-spline d'ordre,4	Intervalle de x
$X_i = \frac{1}{6h^3}(x - x_i)^3$	$x_i \leq x < x_{i+1}$
$Y_i = -\frac{1}{2h^3}(x - x_i)^3 + \frac{2}{h^2}(x - x_i) - \frac{2}{h}(x - x_i) + \frac{2}{3}$	$x_{i+1} \leq x < x_{i+2}$
$Z_i = \frac{1}{2h^3}(x - x_i)^3 - \frac{4}{h^2}(x - x_i)^2 + \frac{10}{h}(x - x_i) - \frac{22}{3}$	$x_{i+2} \leq x < x_{i+3}$
$W_i = B_i^4 = \frac{1}{6h^3}(x_{i+4} - x)^3$	$x_{i+3} \leq x < x_{i+4}$

Tableau.III.3 Fonctions B-spline, ordre 5

Les fonctions B-spline d'ordre, 5	Intervalle de x
$X_i = \frac{1}{24h^4}(x - x_i)^4$	$x_i \leq x < x_{i+1}$
$Y_i = \frac{1}{24} + \frac{1}{6h}(x - x_{i+1}) + \frac{1}{4h^2}(x - x_{i+1})^2 + \frac{1}{6h^3}(x - x_{i+1})^3 - \frac{1}{6h^4}(x - x_{i+1})^4$	$x_{i+1} \leq x < x_{i+2}$
$Z_i = \frac{11}{24} + \frac{1}{2h}(x - x_{i+2}) - \frac{1}{4h^2}(x - x_{i+2})^2 - \frac{1}{2h^3}(x - x_{i+2})^3 - \frac{1}{4h^4}(x - x_{i+2})^4$	$x_{i+2} \leq x < x_{i+3}$
$W_i = \frac{1}{24} + \frac{1}{6h}(x_{i+4} - x) + \frac{1}{4h^2}(x_{i+4} - x)^2 - \frac{1}{6h^3}(x_{i+4} - x)^3 - \frac{1}{6h^4}(x_{i+4} - x)^4$	$x_{i+3} \leq x < x_{i+4}$
$U_i = \frac{1}{4h^4}(x_{i+5} - x)^4$	$x_{i+4} \leq x < x_{i+5}$

Tableau.III.4 Fonctions B-spline, ordre 7

Les fonctions B-spline d'ordre, 7	Intervalle de x
$X_i = \left(\frac{1}{720h^6} (x - x_i)^6 \right)$	$x_i \leq x < x_{i+1}$
$Y_i = \left(\frac{1}{720} + \frac{1}{120h} (x - x_{i+1}) + \frac{1}{48h^2} (x - x_{i+1})^2 \right. \\ \left. + \frac{1}{36h^3} (x - x_{i+1})^3 + \frac{1}{48h^4} (x - x_{i+1})^4 \right. \\ \left. + \frac{1}{120h^5} (x - x_{i+1})^5 - \frac{1}{120h^6} (x - x_{i+1})^6 \right)$	$x_{i+1} \leq x < x_{i+2}$
$Z_i = \left(\frac{19}{210} + \frac{5}{21h} (x - x_{i+2}) + \frac{3}{16h^2} (x - x_{i+2})^2 \right. \\ \left. + \frac{1}{36h^3} (x - x_{i+2})^3 - \frac{1}{16h^4} (x - x_{i+2})^4 \right. \\ \left. - \frac{1}{24h^5} (x - x_{i+2})^5 + \frac{1}{48h^6} (x - x_{i+2})^6 \right)$	$x_{i+2} \leq x < x_{i+3}$
$W_i = \left(\frac{151}{360} + \frac{1}{3h} (x - x_{i+3}) - \frac{5}{24h^2} (x - x_{i+3})^2 \right. \\ \left. + \frac{2}{9h^3} (x - x_{i+3})^3 + \frac{1}{24h^4} (x - x_{i+3})^4 \right. \\ \left. + \frac{1}{12h^5} (x - x_{i+3})^5 + \frac{1}{36h^6} (x - x_{i+3})^6 \right)$	$x_{i+3} \leq x < x_{i+4}$
$U_i = \left(\frac{151}{360} + \frac{1}{3h} (x - x_{i+4}) - \frac{5}{24h^2} (x - x_{i+4})^2 \right. \\ \left. - \frac{2}{9h^3} (x - x_{i+4})^3 + \frac{1}{24h^4} (x - x_{i+4})^4 \right. \\ \left. - \frac{1}{12h^5} (x - x_{i+4})^5 + \frac{1}{48h^6} (x - x_{i+4})^6 \right)$	$x_{i+4} \leq x < x_{i+5}$
$F_i = \left(\frac{1}{720} + \frac{1}{120h} (x_{i+6} - x) + \frac{1}{48h^2} (x_{i+6} - x)^2 \right. \\ \left. + \frac{1}{36h^3} (x_{i+6} - x)^3 + \frac{1}{24h^4} (x_{i+6} - x)^4 \right. \\ \left. + \frac{1}{120h^5} (x_{i+6} - x)^5 - \frac{1}{120h^6} (x_{i+6} - x)^6 \right)$	$x_{i+5} \leq x < x_{i+6}$
$S_i = \left(\frac{1}{720h^6} (x_{i+7} - x)^6 \right)$	$x_{i+6} \leq x < x_{i+7}$

III-3 Formulation de la méthode variationnelle semi inverse-b-Spline

Nous allons maintenant introduire le potentiel de coulomb dans l'équation radiale de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right) R = 0 \quad (III.3)$$

Où : Z le nombre atomique et e la charge de la particule.

Cependant, nous pouvons réécrire l'équation (5.1) sous la forme :

$$U(r; R; R', R'') = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 R}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{mr} \frac{dR}{dr} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right) R = 0 \quad (III.4)$$

Où prime et double prime désignent les dérivées par rapport à r . Les conditions de consistance pour l'existence d'une intégrale fonctionnelle ont été décrites dans la Référence [35-39]. Pour le cas unidimensionnel (1D), nous avons :

$$\frac{\partial U}{\partial R'} = \frac{d}{dr} \left(\frac{\partial U}{\partial R''} \right) \quad (III.5)$$

Nous appliquons la condition de consistance (5.3) à l'équation (5.2), il est aisé de vérifier que cette condition n'est pas satisfaite. Par conséquent, nous utilisons un facteur auxiliaire $g(r)$ et réécrire l'équation. (III. 4) en tant que:

$$Y(r; R; R', R'') = g(r)U(r; R; R', R'') = 0 \quad (III.6)$$

Dans l'équation. (III.5), U est remplacé par Y . Maintenant la condition de consistance est satisfaite à condition que $g(r) = r^2$.

Maintenant, l'équation différentielle (III. 6) peut être dérivée à partir d'une fonction spécifique comme condition stationnaire. Pour trouver cette fonctionnelle, nous appliquons la méthode semi- inverse qui fournit jusqu'à présent la meilleure technique pour établir des principes variationnels pour de nombreux problèmes physiques. L'idée de base de la méthode semi- inverse est illustrée comme suit:

Nous construisons dans une forme alternative un processus général fonctionnel pour l'équation.(III. 6) en tant que:

$$J(R) = \int_0^{+\infty} L dr \quad (III.7)$$

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

$$L = a \frac{\hbar^2}{2m} \left(r \frac{dR}{dr} \right)^2 + b(w(r) - E)(rR)^2 + F \quad (III.8)$$

Où F est une fonction inconnue de R et/ou ses dérivés, a et b sont des constantes arbitraires à déterminer. On utilise la fonction (III. 8), La condition de stationnarité, nous obtenons le principe variationnel nécessaire de l'équation (III. 8)on a :

$$J(R) = \int_0^{+\infty} \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{dR}{dr} \right)^2 + (w(r) - E)R^2 \right\} r^2 dr \quad (III.9)$$

La i ème fonction de base B-Spline d'ordre k (degré $k - 1$) est défini comme suit :

$$B_{i,k}(r) = \frac{r - r_i}{r_{i+k-1} - r_i} B_{i,k-1}(r) + \frac{r_{i+k} - r}{r_{i+k} - r_{i+1}} B_{i+1,k-1}(r) \quad (III.10)$$

$$B_{i,1}(r) = \begin{cases} 1, & t_i \leq r < t_{i+1} \\ 0, & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (III.11)$$

Il s'ensuit que chaque B-Spline $B_{i,k}(r)$ diffère du zéro seulement dans le domaine $t_i \leq r < t_{i+1}$. Autrement, nous étendons la solution comme une combinaison linéaire de fonctions de B-spline dans lequel les coefficients q_i Sont supposés des inconnus à déterminer.

$$R(r) = S_\infty(r) \sum_{i=0}^{N-1} q_i B_i(r) \quad (III.12)$$

Où nous avons maintenant baissé l'indice k sur le $B_{i,k}(r)$ pour simplicité d'écriture. La fonction $S_\infty(r)$ exprime les comportements asymptotiques des solutions en ce qui concerne les grandes distances.

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

III-4 Application numérique

Pour illustrer comment fonctionne cette méthode et voir si elle est efficace, un bon test peut être fait par examen d'un exemple physique réel. Être plus précis, nous utilisons donc le cas du moment angulaire $l = 0$ (*l'état s*), $l = 1$ (*l'état p*) et $l = 2$ (*l'état d*).

Nous pouvons deviner les solutions en mettant la forme suivante aux fonctions d'onde radiales

$$R(r) = \exp^{-cr} \sum_{i=0}^{N-1} A_i B_i(r) \quad (III.13)$$

Remarque : En pratique nous avons pris la fonction radiale $R(r)$ comme étant une combinaison linéaire des B-splines $B_i(r)$ qui contiennent tous les comportements asymptotiques possibles de la manière suivante :

$$R(r) = \sum_{i=0}^{N-1} A_i B_i(r)$$

Cette représentation est faisable parce que les profils de toutes les configurations peuvent être approchés par des polynômes.

Où c et A_j sont des quantités constantes à déterminer, et sont utilisés comme des paramètres variationnels libres du problème à l'étude. ces paramètres variationnels sont déduits de la variationnelle fonctionnelle $J(R)$ (équation(III.9)) qui soumise à la condition de minimisation :

$$\delta J(R) = 0 \quad (III.14)$$

La condition d'optimisation (III.14) donne les ensembles d'équations algébriques en termes des paramètres variationnels. Dans tous les exemples nous adoptons le système des unités atomiques dans lequel $\hbar = m = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1$.

Solution pour le cas: $l = 0$

Nous cherchons des solutions sous la forme :

$$R(r) = \exp^{-\alpha r} \sum_{i=0}^{N-1} \beta_i B_i(r) \quad (III. 15)$$

Dans l'intervalle $[a, b]$, où $N = 10$, le degré de B-spline $k = 2$ et une séquence de nœud approprié est choisi comme :

$$a = 0 = r_0 < r_1 < \dots < r_{N+k} = b = 35,$$

Et en mettant $Z = 1$.

En remplaçant (III. 15) dans (III. 9), puis en utilisant la condition de minimisation (III. 14) avec respect à $\{\beta_i\}_{i=0}^{N-1}$ et α et Avec Mathematica on obtient un système d'équations algébriques de $\{\beta_i\}_{i=0}^{N-1}$, α et E .

Nous trouvons pour les énergies E les valeurs suivantes:

$$E = \begin{cases} -0.129367 \\ -0.0549583 \\ -0.0277147 \end{cases} \quad (III. 16)$$

Tableau.III.5 décrit les solutions pour le cas ($l = 0; n = 2, n = 3, n = 4$) , calculée par la méthode semi inverse variationnelle B-Spline, dans laquelle on a pris des différents degrés de B-Spline, et différents nombres de points, dans l'intervalle $[0 - 35]$.

		<i>cas n° 1</i>	<i>cas n° 2</i>	<i>cas n° 3</i>
<i>Energie</i>	<i>E (exacte)</i>	<i>E (numérique)</i>	<i>E (numérique)</i>	<i>E (numérique)</i>
<i>intervalle</i>		[0 – 35]	[0 – 35]	[0 – 35]
<i>Degré k</i>		2	3	3
<i>Nbs de points</i>		10	10	15
E_{20}	-0.125	-0.129367	-0.106182	-0.12995
E_{30}	-0.0555555	-0.0549583	-0.0480474	-0.0556339
E_{40}	-0.03125	-0.0277147	-0.021649	-0.0280151

Solution pour le cas: $l = 1$

La solution que nous recherchons est exprimée sous la forme :

$$R(r) = \exp^{-\gamma r} r \sum_{i=0}^{N-1} \delta_i B_i(r) \quad (III.17)$$

Dans l'intervalle $[a, b]$, où $N = 10$, le degré de B-Spline $k = 2$ et une séquence de nœud approprié est choisi comme :

$$a = 0 = r_0 < r_1 < \dots < r_{N+k} = b = 30, \text{ et on pose } Z = 1$$

en remplaçant (III.17) dans (III.9), puis en utilisant la condition de minimisation (III.14) avec respect à $\{\delta_i\}_{i=0}^{N-1}$ et γ et Avec Mathematica on obtient un système d'équations algébriques de $\{\delta_i\}_{i=0}^{N-1}$, γ et E . Nous trouvons pour les énergies E les valeurs suivantes:

$$E = \begin{cases} -0.123155 \\ -0.0549161 \\ -0.0348419 \end{cases} \quad (III.18)$$

Tableau.III.6 : décrit les solutions pour le cas $l = 1$, calculée par la méthode semi inverse variationnelle B-Spline, dans laquelle on a pris des différents degrés de B-Spline, dans les intervalles $[0 - 30]$ et $[0 - 40]$.

		<i>cas n°1</i>	<i>cas n°2</i>	<i>cas n°3</i>
<i>Energie</i>	<i>E (exacte)</i>	<i>E (numérique)</i>	<i>E (numérique)</i>	<i>E (numérique)</i>
<i>Intervalle</i>		[0 – 30]	[0 – 30]	[0 – 40]
<i>Degré k</i>		2	3	3
<i>Nbs de points</i>		10	10	10
E_{21}	-0.125	-0.123155	-0.124005	-0.12303
E_{31}	-0.0555555	-0.0549161	-0.0553032	-0.0548422
E_{41}	-0.03125	-0.0348419	-0.0350216	-0.0317769

Solution pour le cas: $l = 2$

Tableau.III.7(a, b et c): décrit les solutions pour le cas $l = 2$, calculée par la méthode variationnelle semi- inverse B-Spline, dans laquelle on a pris des différents degrés de B-Spline, et différents nombres de points, dans les intervalles $[0 - 35]$ et $[0 - 40]$.

Tableau.III.7.a

		<i>cas n°1</i>	<i>cas n°2</i>
<i>Energie</i>	<i>E (exacte)</i>	<i>E (numérique)</i>	<i>E (numérique)</i>
<i>intervalle</i>		$[0 - 35]$	$[0 - 40]$
<i>Degré k</i>		2	2
<i>Nbs de points</i>		8	8
E_{32}	-0.0555555	-0.0547537	-0.0541589
E_{42}	-0.03125	-0.0322273	-0.0298819

Tableau.III.7.b

		<i>cas n°3</i>	<i>cas n°4</i>
<i>Energie</i>	<i>E (exacte)</i>	<i>E (numérique)</i>	<i>E (numérique)</i>
<i>intervalle</i>		$[0 - 40]$	$[0 - 40]$
<i>Degré k</i>		3	3
<i>Nbs de points</i>		8	10
E_{32}	-0.0555555	-0.0512694	-0.0528251
E_{42}	-0.03125	-0.0278814	-0.0289705

Tableau.III.7.c

		<i>cas n°5</i>	<i>cas n°6</i>	<i>cas n°7</i>
<i>Energie</i>	<i>E (exacte)</i>	<i>E (numérique)</i>	<i>E (numérique)</i>	<i>E (numérique)</i>
<i>intervalle</i>		[0 – 40]	[0 – 40]	[0 – 40]
<i>Degré k</i>		1	2	3
<i>Nbs de points</i>		8	8	8
E_{32}	-0.0555555	-0.0555552	-0.0541589	-0.0512694
E_{42}	-0.03125	-0.0307733	-0.0298819	-0.0278814

III-5 Présentations Graphiques

Le cas: $l = 0$

La représentation graphique des fonctions d'ondes qui correspondent aux énergies calculées a été déduite à partir de la combinaison linéaire suivante :

$$\psi(r) = \sum C_i B_i(r)$$

Où C_i : sont les coefficients correspondants à chaque énergie.

$B_i(r)$: sont les fonctions B-Spline.

on prend le cas *cas n°2*: ($k = 2, N = 10$), Nous obtenons les états de configuration suivants : 2s, 3s et 4s à savoir R_{20} , R_{30} et R_{40} respectivement.

L'énergie de l'état 2s est donnée par : $E_{20} = -0.129367$, définit le premier état excité avec la fonction d'onde suivante :

$$R_{20} = \sum_{j=1}^{N-1} C_j B_j(r)$$

On trouve les paramètres C_j comme suit :

$$C_i = \begin{cases} 90069.5 \\ 31346.6 \\ 11047.3 \\ 3087.55 \\ 898.831 \\ 232.92 \\ 63.2598 \\ 15.7443 \\ 4.10941 \end{cases}$$

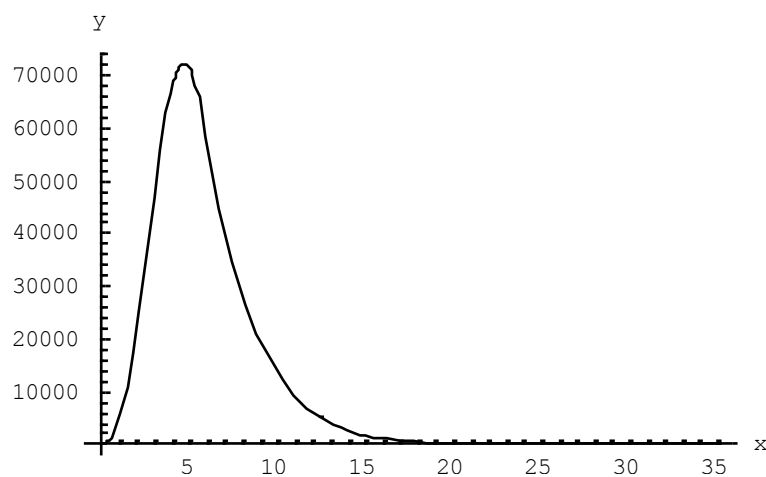


Figure. III.1 : $y(x) = R(r)$ représente le 1^{er} état excité $R_{20}(r)$ ($l = 0$, le cas $n^{\circ}2$)

L'énergie de l'état 3s est donnée par : $E_{30} = -0.0549583$, définit deuxième état excité avec la fonction d'onde suivante :

$$R_{30} = \sum_{j=1}^{N-1} C_j B_j(r)$$

On trouve les paramètres C_j comme suit :

$$C_i = \begin{cases} -97.3866 \\ 11.7792 \\ 45.4348 \\ 43.0562 \\ 29.7387 \\ 17.794 \\ 9.72108 \\ 4.97148 \\ 2.34532 \end{cases}$$

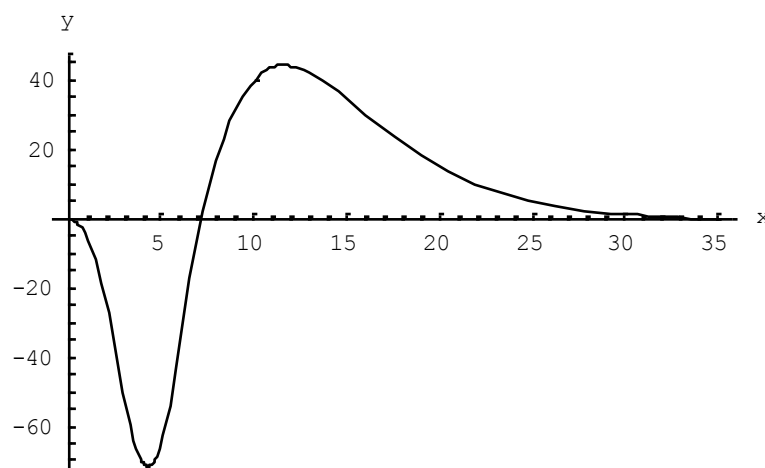


Figure. III.2 : $y(x) = R(r)$ représente le 2^{ème} état excité $R_{30}(r)$ ($l = 0$, le cas $n^\circ 2$).

L'énergie de l'état 4s est donnée par : $E_{40} = -0.0277147$, définit troisième état excité avec la fonction d'onde suivante :

$$R_{40} = \sum_{j=1}^{N-1} C_j B_j(r)$$

On trouve les paramètres C_j comme suit :

$$C_i = \begin{cases} 10.1775 \\ -2.73373 \\ -5.15409 \\ -2.55106 \\ 0.664368 \\ 2.56835 \\ 3.06601 \\ 2.66061 \\ 1.82896 \end{cases}$$

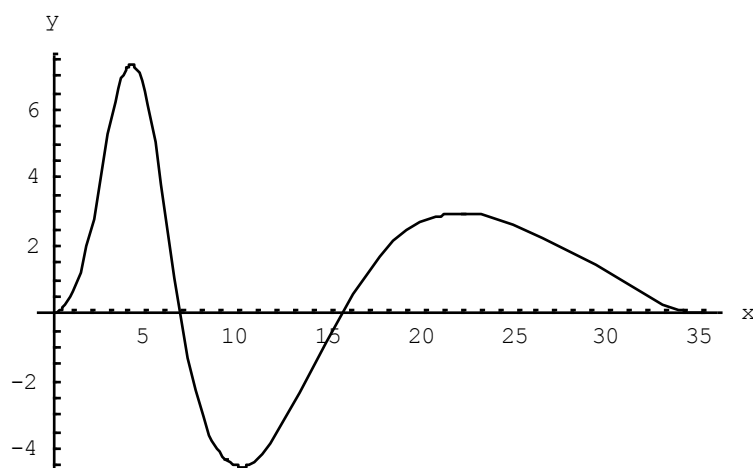


Figure. III.3 : $y(x) = R(r)$ représente le 3^{ème} état excité $R_{40}(r)$ ($l = 0$, le cas $n^{\circ}2$).

Le cas: $l = 1$

Dans les figures, nous affichons la variation des états d'ondes p par rapport à r pour représenter les trois fonctions d'onde non normalisée $R_{21}(r)$, $R_{31}(r)$ et $R_{41}(r)$.

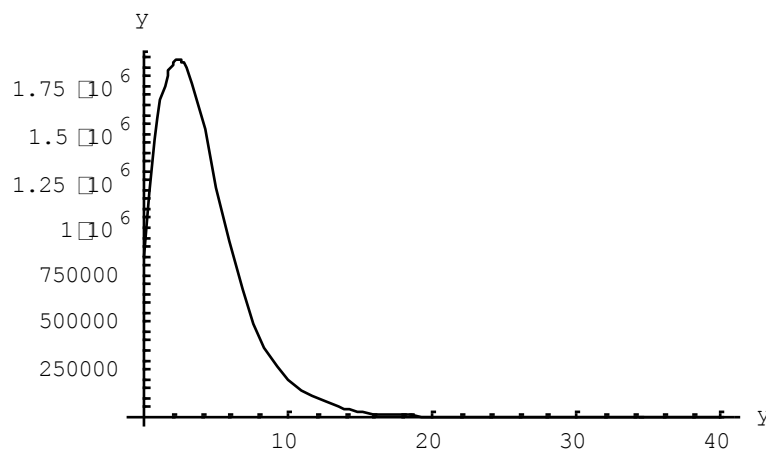


Figure. III.4 : $y(x) = R(r)$ représente l'état fondamental $R_{21}(r)$ ($l = 1$, le cas $n^{\circ}3$).

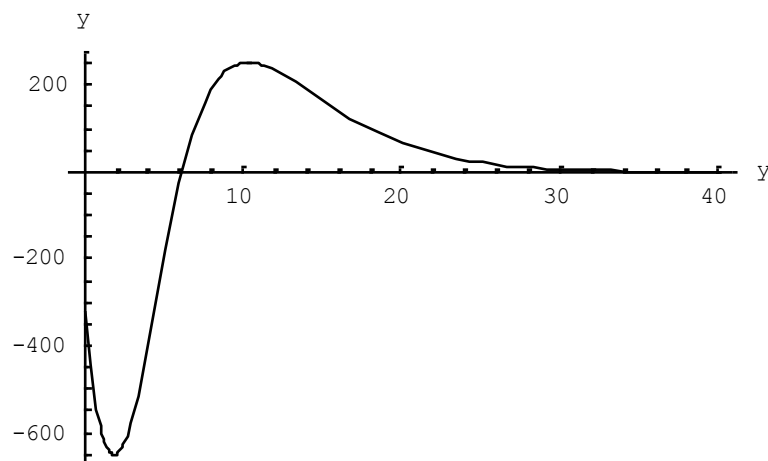


Figure. III.5 : $y(x) = R(r)$ représente le 1^{er} état excité $R_{31}(r)$ ($l = 1$, le cas $n^{\circ}3$).

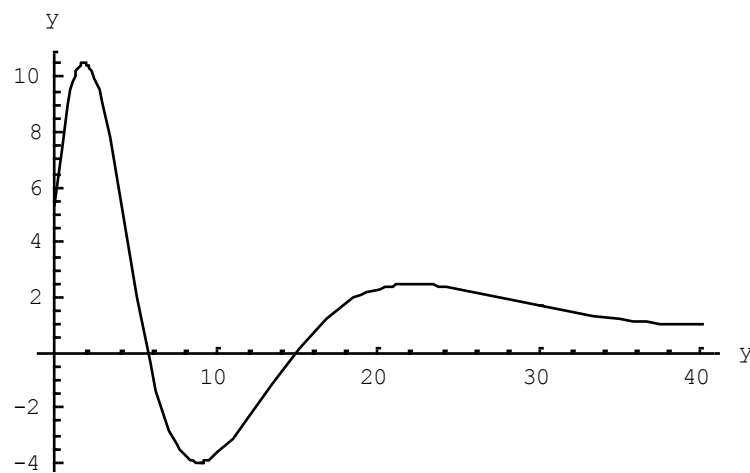


Figure. III.6 : $y(x) = R(r)$ représente le 2^{ième} état excité $R_{41}(r)$ ($l = 1$, le cas $n^{\circ}3$).

Le cas: $l = 2$

Dans les figures, nous affichons la variation des états d'ondes d par rapport à r pour représenter les deux fonctions d'onde non normalisée $R_{32}(r)$ et $R_{42}(r)$.

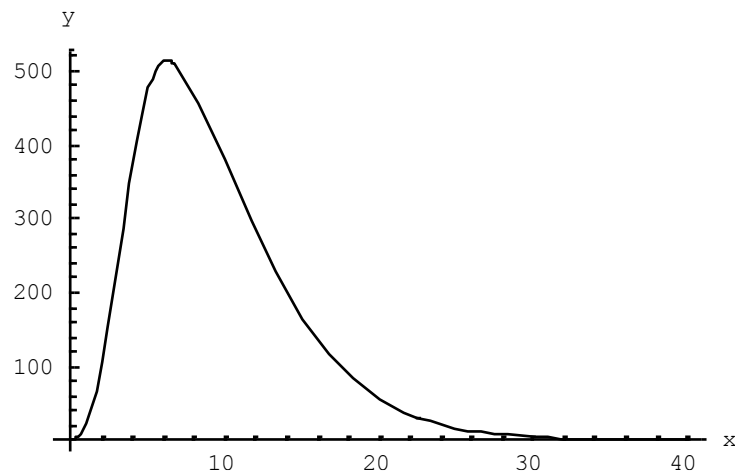


Figure. III.7: $y(x) = R(r)$ représente l'état fondamental $R_{32}(r)$ ($l = 2$, le cas $n^{\circ}2$).

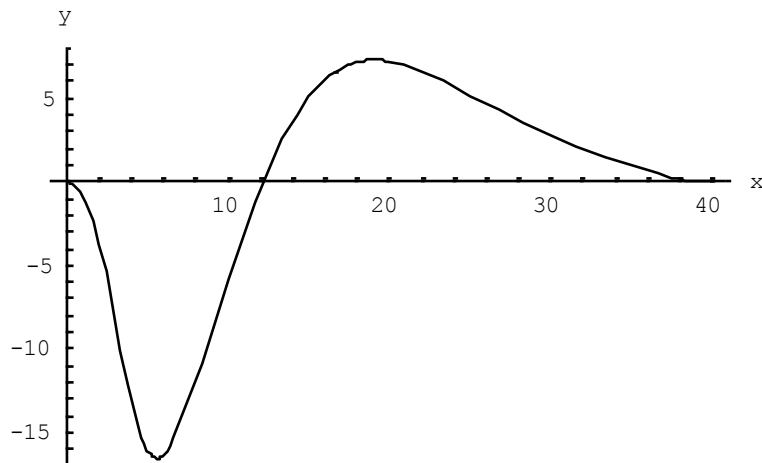


Figure. III.8 : $y(x) = R(r)$ représente le 1^{er} état excité $R_{42}(r)$ ($l = 2$, le cas $n^{\circ}2$).

III.6 Discussion et Conclusion

la méthode variationnelle semi-inverse-B-Spline appliquée aux cas $l = 0, l = 1, l = 2$, donne d'excellents résultats.

- **Pour $l = 0$** , on trouve trois états, le premier état excité, le deuxième état excité et le troisième état excité. Dans ce cas, nous avons trouvé des résultats excellents pour le degré 3 mais plutôt mieux pour le cas du degré 2, utilisé avec le même intervalle $[0 - 35]$ et le même nombre de points, c.à.d. si on augmente le degré de B-spline, le résultat ne s'améliore pas. Si on augmente le nombre de points, on trouve des meilleurs résultats, voir le **tableau.III.5**.

Remarque pour le cas $l = 0$:

Les résultats obtenus pour les énergies sont bons avec le choix modéré du degré et le nombre de B-splines incorporé aux fonctions d'ondes, par contre les fonctions radiales ne sont pas bien représentées. Il faut pousser le calcul avec des degrés très supérieur à 2 et l'inclusion d'un grand nombre de B-spline, mais en contrepartie le programme demande un temps d'exécution énorme. Plus clairement, en fait, les fonctions sont décalées plus à gauche et une partie n'est pas bien représentée due à la remarque signalée ici. Autrement dit, nous avons perdu un changement de signe dans cette zone pour toutes les configurations : en effet la fonction radiale $R_{20}(r)$ décrit le 1er état excité, $R_{30}(r)$ décrit le 2ème état excité et $R_{40}(r)$ décrit le 3ème état excité.

- **Pour $l = 1$** , on trouve trois états, l'état fondamental, le premier état excité et le deuxième état excité. dans l'intervalle $[0 - 30]$, si on augmente le degré de B-spline, le résultat s'améliore pour l'état fondamental et le premier état excité et le contraire avec le deuxième état excité, mais dans l'intervalle $[0 - 40]$, nous avons trouvé d'excellents résultats. Dans l'intervalle $[0 - 30]$, les résultats ne sont pas déterminés complètement car cet intervalle ne représente pas le domaine complet de la fonction d'onde de deuxième état excité. Si on élargit l'intervalle comme $[0 - 40]$, le résultat s'améliore. Avec la même discussion, avec le même degré, quand on varie l'intervalle entre $[0 - 30]$ et $[0 - 40]$, le résultat s'améliore pour le deuxième état excité et le contraire avec les autres états, voir le **tableau.III.6**.
- **Pour $l = 2$** , on trouve deux états, l'état fondamental et le premier état excité. On utilise trois variantes, la largeur de l'intervalle, le nombre de points et le degré de B-spline.

La largeur d'intervalle : si on élargit l'intervalle comme $[0 - 40]$, le résultat s'améliore pour le premier état excité mais le contraire avec l'état fondamental, voir le **tableau.III.7.a**.

Nombre de points : si nous augmentons le nombre de points, ou nous diminuons le pas de B-spline, nous pourrions obtenir une précision très grande, mais, en contrepartie le temps de calcul devient considérable, voir le **tableau.III.7.b**.

Le degré de B-spline : si nous augmentons le degré de B-splines, ou autrement dit nous augmentons le nombre de fonctions splines, la précision de résultat est diminuée, voir le **tableau.III.7.c**.

D'après l'ensemble des résultats obtenus au cours du traitement de la méthode variationnelle semi inverse B-Spline, nous pouvons objectivement conclure :

Avec un bon choix de l'intervalle et un pas adéquat, la méthode donne d'excellentes valeurs pour les énergies et une meilleure représentation de la fonction d'onde.

Les énergies des états liés pour le cas fondamental, le premier et le second état excité sont obtenues avec une excellente précision.

Les résultats obtenus ont été confirmés avec un accord très satisfaisant avec la méthode des séries entières.

Cette investigation prometteuse fournit en plus des idées sur l'adaptation de la méthode variationnelle semi inverse B-Spline pour ce type de potentiel et peut être aussi sans crainte adaptée pour d'autres variétés de potentiel compliqués.

Conclusion Générale

En mécanique quantique l'état d'un système est donné par la fonction d'onde qui est la solution de l'équation de Schrödinger. Ainsi donc, ce travail fait intervenir une nouvelle méthode variationnelles spécialement la méthode semi- inverse variationnelle et sa combinaison avec les fonctions B-Splines pour résoudre l'équation de Schrödinger radiale. Le potentiel mis en action est par excellence le potentiel Coulombien. Après une introduction aux calculs variationnel et la présentation de l'équation d'EulerLagrange, Nous avons aussi fait un bref rappel de l'équation de Schrödinger stationnaire.

Dans ce travail, Nous sommes arrivés aux résultats corrects produits par l'image quantique dans le cadre de l'introduction de l'équation de Schrödinger. Le potentiel en 3D radial est utilisé dans le traitement de l'équation de Schrödinger. Nous avons testé quelques configurations des états et les énergies obtenues sont exactes.

D'après l'ensemble des résultats obtenus au cours de ce travail, nous pouvons tirer les faits suivants :

Avec un bon choix de l'intervalle et l'augmentation de degré des B-Spline, et que le choix de l'intervalle doit inclure obligatoirement toutes les fonctions B-Splines ayant un degré donné. Cette remarque n'est pas la seule, mais c'est une condition nécessaire pour offrir une garantie des résultats sans se soucier d'une éventuelle surprise inattendue.

Cette technique de calcul, peut être appliquée avec succès à d'autres opérateurs comme l'Hamiltonien de Dirac. Cette question sera discutée dans un travail futur et constituera une suite à ce travail.

Enfin, les résultats obtenus jusqu'à maintenant nous encouragent à souligner la nécessité d'une élaboration plus poussée, du point de vue numérique, l'introduction d'une base étendue dans la présentation des fonctions d'onde à partir des B-Splines.

Bibliographie

- [1] J. Weyers, F. Maltoni, Physique générale III (Mécanique quantique), Université catholique de Louvain, Faculté des sciences département de physique, (2006-2007), Note du cour phy 1222, p.14.
- [2] S. Teber, Mécanique Quantique(4P001), Master de Sciences et Technologie Mention Physique et Applications (M1) Approche "Physique Fondamentale" (PF), Université Pierre et Marie Curie Paris.
- [3] H. Bouchriha, Introduction à la physique quantique, centre de publication universitaire(2002), p.87.
- [4] Liyao and J-R. Chang, Variationnel Principle For Nonlinear Schrodinger Equation With High Nonlinearity, The Journal of Nonlinear sciences and its Applications, J.Nonlinear Sci. Appl. 1 (2008), no. 1, 1-4.
- [5] W. Zhang, Generalized Variational Principle For Long Water-Wave Equation by He's Semi-Inverse Method, Mathematical problems in Engineering, Volume 2009, ID 925187, p 5.
- [6] B. Dacorogna, Introduction au calcul des variations, Springer verlag, Berlin, (1998).
- [7] C. Muriel and J. L. Romero, "New methods of reduction for ordinary differential equations", IMA Journal of Applied Mathematics, vol. 66, no. 2, pp. 111–125, 2001.
- [8] I. Anderson, G. Thompson, The inverse problem of the calculus of variations for ordinary differential equations. Mem Amer Math Soc 1992;98(473).
- [9] T. Bécherrawy, Optique géométrique, éditions de boeck, 2006.
- [10] J.-B. Hiriart-Urruty, Du calcul différentiel au calcul variationnel : un aperçu de l'évolution de P. Fermat à nos jours, Quadrature, magazine de mathématiques pures et appliquées, 2008.
- [11] D. Phan, Introduction Au Calcul des Variation, 22 mars 2010.
- [12] O.HaifKhaif, "Contribution à l'étude des solutions de certains problèmes de mécanique quantique au moyen des approches B-Spline et polynomiales", Thèse de Doctorat, université de Biskra, (2018).
- [13] Pierre Bérest, Calcul des variations : Application à la mécanique et à la physique, Ellipses, 1997, p 256. (ISBN 978-2-7298-9704-8).

- [14] F. Hazreche, "modélisation numérique pour générer l'énergie de l'état lié par la méthode variationnelle semi-inverse", mémoire de Master, université de Biskra, (2015-2016).
- [15] N. Sator, Introduction au principe variationnel et la mécanique analytique, LPTM, université Pierre et Marie Curie 6, octobre 2010.
- [16] O.HaifKhaif, "Contribution à l'étude des solutions de certains problèmes de mécanique quantique au moyen des approches B-Spline et polynomiales", Thèse de Doctorat, université de Biskra, (2018).
- [17] M.Benaissa, "Introduction de quelques approches variationnelles récentes", mémoire de Master, université de Biskra, (2013-2014).
- [18] H. Erlichson, Johann Bernoulli's brachistochrone solution using Fermat's principle of least time, Eur.J.phys, UK, 20(1999), p.299-304.
- [19] H. Saidi, "Introduction de la méthode quadratique différentielle généralisée dans le traitement du potentiel coulombien 'écrané'", Thèse de Doctorat, université de Biskra, (2004).
- [20] K. Libarir, "Sur la structure des états quantiques via les approches des perturbations et des variations", Thèse de Doctorat, université de Biskra, (2018).
- [21] B. Nine, O. Haif-Khaif and A. Zerarka, Applied Mathematics and Computation: 178 (2006) 486.492.
- [22] A. Simatra, Introduction à la mécanique quantique, septembre 2008.
- [23] N. Bensalah, "Les états liés et de diffusions et l'introduction du Super potentiel", Thèse de Doctorat, université de Biskra, (2013).
- [24] R. Khllil, "La solution de l'équation de Schrödinger avec le potentiel Killingbeck", mémoire de Master, université de Biskra, (2016-2017).
- [25] M. Benaissa, "Introduction de quelques approches variationnelles récentes", mémoire de Master, université de Biskra, (2013-2014).
- [26] N. Bensalah, "Les états liés et de diffusions et l'introduction du Super potentiel", Thèse de Doctorat, université de Biskra, (2013).
- [27] H. Saidi, "Introduction de la méthode quadratique différentielle généralisée dans le traitement du potentiel coulombien 'écrané'", Thèse de Doctorat, université de Biskra, (2004).
- [28] N. Bensalah, "Etats liés exacts ou quasi-exacts de certaines interactions atomique et moléculaires", Thèse de Magister, université de Biskra, (2003).

- [29] O. HaifKhaif, "Contribution à l'étude des solutions de certains problèmes de mécanique quantique au moyen des approches B-Spline et polynomiales", Thèse de Doctorat, université de Biskra, (2018).
- [30] C. Fscher and M. Idrees, *Comput. Phys.* 3,53, (1989).
- [31] J. Sapirstein and W. R. Johnson, *J. phys. B.* 29, 5213, (1996).
- [32] YanghuiQiu, *Integration*, Vanderbilt University, Thesis, May, (1999)Unpublished.
- [33] A.Zerarka, K. Chabbi and Y. Boumedjane. *VI^{èmes} Journées de Chimie*, Univ deBiskra, 13-15 Avril, 2004.
- [34] R. Khllil, "La solution de l'équation de Schrödinger avec le potentiel Killingbeck", mémoire de Master, université de Biskra, (2016-2017).
- [35] Atherton RW,Homsy GM. *Stud Appl Math* 1975;54:31.
- [36] Bhutani OP, Sharma S. *Int J Eng Sci* 1979;17:475.
- [37] A. Zerarka, K. Libarir, A semi-inverse variational method for generating the bound state energy eigenvalues in a quantum system: The Schrödinger equation.*Commun Nonlinear SciNumerSimulat*, 14 (2009) 3195–3199.
- [38] A. Zerarka, O. Haif-Kaif, K. Libarir, A. Attaf, Numerical Modeling for Generating the Bound State Energy via a Semi Inverse Variational Method Combined with a B-Spline Type Basis, *CHIN. PHYS. LETT.* Vol. 28, No. 1(2011) 010202.
- [39] Bhutani O P and Sharma S 1979 *Int. J. Engin. Sci.* 17475.

قمنا بإدخال مبدأ التغيرات للبحث عن الحلول في إطار كوانتي. استعملنا طريقة شبه عكسية التغيرات مع الدوال ب-سبيلين من أجل إيجاد بنية الحالات المرتبطة لمعادلة شرودنجر. عالجتنا الطاقات والحالات المرتبطة الموافقة لأنظمة كمون من النوع كولوم.

النتائج المتحصل كانت جد مرضية.

Résumé

Nous avons introduit le formalisme variationnel pour chercher les solutions dans le cadre quantique. Nous avons utilisé la méthode variationnelle semi-inverse ensemble avec les bases B-Splines pour extraire les structures des états liés de l'équation de Schrödinger. Nous avons traité les énergies et les états liés correspondants pour les systèmes de potentiel du type de coulomb.

Des résultats très satisfaisant ont été obtenus.

Abstract

We introduced the variational formalism to search solutions in the quantum framework. We used the semi inverse variational method together with B-spline bases to extract the structures of bound states of the Schrödinger equation. We treated the energies and corresponding bound states for the systems of potential of the type de coulomb.

Results very satisfactory were obtained.