



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la
Recherche Scientifique

Université Larbi Tébessi -Tébessa-
Faculté des Sciences Exactes et Sciences de la
Nature et de la Vie

Département : Sciences de la Matière



N d'ordre :.....

Série :.....

Mémoire

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de

Master

Option : *Physique de la Matière Condensée*

Thème



Les solutions exactes de l'équation de Schrödinger pour un potentiel de Morse déformé avec une masse dépendante de la position

Présenté par :

Siouane Soumaia et Fares Sana

Devant le jury

Benkhedir Mohamed Loutfi	Prof	Président	Université Larbi-Tébessi, Tébessa
Abdelmalek Boumali	Prof	Rapporteur	Université Larbi-Tébessi, Tébessa
Bougroura Hamza	MCB	Examineur	Université Larbi-Tébessi, Tébessa

Date de Soutenance : 24 Juin 2019



Déclaration sur l'honneur de non-Plagiat

(À joindre obligatoirement au mémoire; Remplie et signée)



Nous soussignons

Nom, prénom: Souhane Saoumaïev & Fares Sana

N° de carte d'étudiant: (1) 34032965/14 (2) 34020332/14

Régulièrement inscrits (es) en **Master** au **Département Sciences de la Matière**

Année universitaire: **2018/2019**

Domaine: **Sciences de la matière**

Filière: **Physique**

Spécialité: Physique de la matière condensée

Intitulé du mémoire:

Les solutions exactes de l'équation de Schrödinger pour un potentiel de Morse déformé avec une Masse dépendante de la position

Attestons que notre mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Nous certifions également que nous n'avons ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article, ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé:

Les étudiants seront convoqués devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont:

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent.
- L'exclusion d'une année du master.
- L'exclusions définitive.

Handwritten signature in blue ink



Fait à Tébessa, le: 07-07-2019

Signature des étudiants (es):

(1): *Handwritten signature* (2): *Handwritten signature*

لبيوات لسمية

فارس حسناء

الموضوع: دقة دمج التواء المذكرة


تدعى دقة الكليات لبيوات لسمية و فارس حسناء وتقر
بالا دقة المناقشة التي تم دمج التواء المذكرة من
إرفاق المذكرة التي حاسر له قيزاد المادة المذكرة لبيوات

« Les solutions exactes de l'équation de Schrödinger
Pour un potentiel de Morse déformé avec une
Masse dépendante de la position »

والكم منا طاقة التغير والامتزاز

المستاد المصطفى

المستاد الرئيس

المستاد المؤطر
بالمعهد العالي




République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la
Recherche Scientifique

Université Larbi Tébessi -Tébessa-
*Faculté des Sciences Exactes et Sciences de la
Nature et de la Vie*

Département : Sciences de la Matière



N d'ordre :.....

Série :.....

Mémoire

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de
Master

Option : *Physique de la Matière Condensée*

Thème

Les solutions exactes de l'équation de Schrödinger pour un potentiel de Morse déformé avec une masse dépendante de la position

Présenté par :

Siouane Soumaia et Fares Sana

Devant le jury

Benkhedir Mohamed Loutfi	Prof	Président	<i>Université Larbi-Tébessi, Tébessa</i>
Abdelmalek Boumali	Prof	Rapporteur	<i>Université Larbi-Tébessi, Tébessa</i>
Bougroura Hamza	MCB	Examineur	<i>Université Larbi-Tébessi, Tébessa</i>

Date de Soutenance : 24 Juin 2019

© *Mémoire effectué au
Laboratoire de Physique Appliquée et Théorique*



**Les solutions exactes de l'équation de
Schrödinger pour un potentiel de Morse
déformé avec une masse dépendante de
la position**

Souane Soumaia et Fares Sana

ملخص

في هذه المذكرة قننا بدراسة الحلول الدقيقة لمعادلة شرودنغاردات بعد واحد تحت تأثير كتلة متعلقة بالموضع بوجود كمون مورس المشوه. في هذا السياق قننا بدراسة أثر الكتلة المتغيرة بدلالة الموضع وكذا التشوه على الخواص الحرارية لبعض الجزيئات المختارة مثل H_2, CO, HCl, LiH

Abstract

In this dissertation ,we have studied the exact solutions of the one-dimensional Schrödinger equation under the influence of a localized mass in the presence of deformed Morse potential. The effect of the variable mass in space. and the deformation on the thermal properties of selected molecules such as H_2 , CO , HCl , LiH , is well discussed.

Résumé

Dans ce mémoire, nous avons étudié les solutions exactes de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle sous l'influence d'une masse localisée en présence de potentiel de Morse déformé. L'effet de la déformation due aux paramètres η et q sur les propriétés thermiques des molécules sélectionnées tels que H_2 , CO , HCl et LiH est bien discuté.

Dédicace

*A ma mère et mon père,
A mes sœurs,
A mes frères,
A ma famille,
A tout mes amis,
A tout mes collègues,
et à tout mes enseignants ,
et Spécialement à mon encadreur Professeur Boumali Abdelmalek,*

Je dédie cet humble travail.

Remerciements

Nous remercions en premier lieu ALLAH le tout puissant de nous avoir accordé la puissance et la volonté, la chance de poursuivre pour terminer ce travail.

Nous tenons vivement à exprimer notre profonde reconnaissance à Monsieur Abdelmalek Boumali, Professeur à l'université de Tébessa, pour avoir dirigé ce sujet, pour son suivi permanent, ses conseils judicieux et l'aide constante qu'il nous a prodigué au cours de l'élaboration de ce travail.

Nous remercions vivement M. Benkhedir Mouhamed Loutfi, Professeur à l'Université de Tébessa, pour l'honneur qu'il nous a fait en présidant le jury de notre mémoire

Nous exprimons nos remerciements à Monsieur Bougroura Hamza, Maître de Conférences B à l'Université de Tébessa, qui a accepté d'être examinateur de cet mémoire.

Nous adressons nos vifs remerciements à tout nos amis de partout et d'ailleurs pour leur présence et leur aide.

Table des matières

ملخص	i
Abstract	ii
Résumé	iii
Dédicace	iv
Remerciements	v
Liste des Tableaux	vii
Liste des Figures	ix
Liste des symboles	xiv
Les Chapitres	
Introduction	1
Les Chapitres	
1 L'équation de Schrödinger en présence d'une masse dépendante de la position	3
1.1 Rappel	3

1.2	Invariance galiléenne	4
1.3	Invariance galiléenne instantanée	7
1.3.1	IGI pour une particule quantique unidimensionnelle avec une masse constante	7
1.3.2	IGI pour une particule quantique unidimensionnelle avec PDM . .	10
2	Les solutions exactes du potentiel de Morse déformé en présence d'une masse dépendante de la position	14
2.1	Rappel	14
2.1.1	La méthode de Nikiforov-Uvarov (NU)	14
2.1.2	L'équation de Schrödinger pour une masse dépendante de l'espace	15
3	Les propriétés thermodynamiques du potentiel de Morse déformé via l'ap- proche d' Euler-Maclaurin	33
3.1	Les propriétés thermodynamiques	33
3.1.1	L'approche d'Euler-Maclaurin	33
3.2	La molécule H_2	37
3.3	La molécule CO	47
3.4	La molécule HCl	57
3.5	La molécule LiH	67
	Conclusion	80
	Bibliography	81

Liste des tableaux

Table	page
Table	page
2.1 Paramètres spectroscopiques	20
2.2 Valeurs du nombre quantique $n_{max} : a = 0 (U_{\alpha\beta\gamma} = 0)$ pour la molécule H_2	21
2.3 Valeurs du nombre quantique n_{div} pour la molécule H_2	22
2.4 Valeurs du nombre quantique n_{max} et $n_{div} : a \neq 0 (U_{\alpha\beta\gamma} \neq 0)$ pour la molécule H_2	23
2.5 Valeurs du nombre quantique $n_{max} : a = 0 (U_{\alpha\beta\gamma} = 0)$ pour la molécule CO	24
2.6 Valeurs du nombre quantique n_{div} pour la molécule CO	25
2.7 Valeurs du nombre quantique n_{max} et $n_{div} : a \neq 0 (U_{\alpha\beta\gamma} \neq 0)$ pour la molécule CO	26
2.8 Valeurs du nombre quantique $n_{max} : a = 0 (U_{\alpha\beta\gamma} = 0)$ pour la molécule HCl	27
2.9 Valeurs du nombre quantique n_{div} pour la molécule HCl	28
2.10 Valeurs du nombre quantique n_{max} et $n_{div} : a \neq 0 (U_{\alpha\beta\gamma} \neq 0)$ pour la molécule HCl	29
2.11 Valeurs du nombre quantique $n_{max} : a = 0 (U_{\alpha\beta\gamma} = 0)$ pour la molécule LiH	30

2.12 Valeurs du nombre quantique n_{div} pour la molécule LiH	31
2.13 Valeurs du nombre quantique n_{max} et $n_{div} : a \neq 0$ ($U_{\alpha\beta\gamma} \neq 0$) pour la molécule LiH	32

Liste des Figures

Figure	page
Figure	page
3.1 Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H2 selon Roos et al [1] : fixant η et variant q	37
3.2 Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H2 selon Roos et al [1] : fixant q et variant η	38
3.3 Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H2 selon Zhu et al [2] : fixant η et variant q	39
3.4 Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H2 selon Zhu et al [2] : fixant q et variant η	40
3.5 Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H2 selon Gora et al [3] : fixant η et variant q	41
3.6 Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H2 selon Gora et al [3] : fixant q et variant η	42
3.7 Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H2 selon Li et al [4] : fixant η et variant q	43
3.8 Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H2 selon Li et al [4] : fixant q et variant η	44

3.9	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H2 selon weyl et al [5] : fixant η et variant q	45
3.10	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H2 selon weyl et al [5] : fixant q et variant η	46
3.11	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Roos et al [1] : fixant η et variant q	47
3.12	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Roos et al [1] : fixant q et variant η	48
3.13	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Zhu et al [2] : fixant η et variant q	49
3.14	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Zhu et al [2] : fixant q et variant η	50
3.15	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Gora et al [3] : fixant η et variant q	51
3.16	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Gora et al [3] : fixant q et variant η	52
3.17	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Li et al [4] : fixant η et variant q	53
3.18	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Li et al [4] : fixant q et variant η	54
3.19	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon weyl et al [5] : fixant η et variant q	55
3.20	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon weyl et al [5] : fixant q et variant η	56
3.21	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Roos et al [1] : fixant η et variant q	57
3.22	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Roos et al [1] : fixant q et variant η	58
3.23	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Zhu et al [2] : fixant η et variant q	59

3.24	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Zhu et al [2] : fixant q et variant η	60
3.25	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Gora et al [3] : fixant η et variant q	61
3.26	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Gora et al [3] : fixant q et variant η	62
3.27	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Li et al [4] : fixant η et variant q	63
3.28	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Li et al [4] : fixant q et variant η	64
3.29	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon weyl et al [5] : fixant η et variant q	65
3.30	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon weyl et al [5] : fixant q et variant η	66
3.31	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Roos et al [1] : fixant η et variant q	67
3.32	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Roos et al [1] : fixant q et variant η	68
3.33	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Zhu et al [2] : fixant η et variant q	69
3.34	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Zhu et al [2] : fixant q et variant η	70
3.35	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Gora et al [3] : fixant η et variant q	71
3.36	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Gora et al [3] : fixant q et variant η	72
3.37	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Li et al [4] : fixant η et variant q	73
3.38	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Li et al [4] : fixant q et variant η	74

3.39	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon weyl et al [5] : fixant η et variant q	75
3.40	Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon weyl et al [5] : fixant q et variant η	76
3.41	Chaleur spécifique C_v en fonction de β pour les quatres molécules H_2 , CO , HCl et LiH	77
3.42	Chaleur spécifique C_v en fonction de β pour les quatres molécules H_2 , CO , HCl et LiH	78
3.43	Chaleur spécifique C_v en fonction de β pour les quatres molécules H_2 , CO , HCl et LiH	79

Liste des symboles

\hbar Constante de Planck

NU Méthode de Nikiforov Uvarov

D_e L'énergie de désociation

q, η Les paramètres de déformation

PDM Position dependent masses

IGI Invariance Galiléenne instantanée

IGT Invariance Galiléenne temporelles

$\alpha\beta\gamma$ Paramètres d'ambiguïtés

m_0 La masse constante

F Energie Libre

C_v La chaleur spécifique

S L'entropie

U Energie Totale

Z La fonction de partition

Introduction

Les groupes quantiques et les algèbres quantiques ont beaucoup attiré l'attention des physiciens et des mathématiciens au cours des huit dernières années. Beaucoup d'intérêt dans ce domaine a été signalé, notamment après l'introduction de l'oscillateur harmonique q -déformé. Les groupes quantiques et les algèbres quantiques ont trouvé des applications inattendues en physique théorique [6]. Du point de vue mathématique, ce sont les q -déformations des algèbres enveloppantes universelles de l'algèbre de Lie correspondant à des exemples concrets d'algèbre de Hopf. Dans la limite où le paramètre de déformation q est égal à 1, on obtient l'algèbre de Lie habituelle.

La réalisation de l'algèbre quantique unitaire de spin $SU(2)$ en termes de l'analogue q -déformé de l'oscillateur harmonique quantique était le début des travaux sur ce sujet [7, 8]. Biedenharn et Macfarlane [9, 10] ont étudié l'oscillateur harmonique q -déformé basé sur une algèbre de création et d'annihilation des opérateurs. Ils ont trouvé le spectre et les valeurs propres d'un tel oscillateur harmonique en supposant l'existence d'une limite inférieure d'énergie. La méthode de la mécanique quantique q -déformée était basée sur les règles de commutations de Heisenberg des bosons. Le paramètre principal tiré de cette méthode est un nombre réel $q \in [0, 1]$, appelée déformation.

Récemment, la théorie du q -déformé est devenue un sujet de grand intérêt, à cause de ces applications dans plusieurs branches de la physique. Ces applications touchent une vaste gamme de domaines, tels que la déformation q de l'oscillateur harmonique [11], l'oscillateur de Morse-déformé [12], le q -déformé classique et quantique pour certains systèmes physiques [13], modèle de Jaynes-Cummings, algèbre q -déformé d'un oscillateur [14], la super-symétrie q -déformée [15], certains potentiels q -déformés [16], les propriétés thermostatiques d'un gaz de Fermi parfait q -déformé [17], l'oscillateur de Tamm-Dancoff q -déformé [18], Approche algébrique des propriétés thermodynamiques des molécules diatomiques [19], symétrie quantique des groupes de molécules diatomiques [20] et enfin la q -déformation fermionique et sa connexion avec la masse effective d'une quasi-particule [21].

En physique atomique et moléculaire, l'interaction entre molécules diatomique, et même dans les molécules polyatomiques, est généralement décrit par le potentiel de Morse [22]. Ce potentiel est le modèle d'un potentiel anharmonique le plus simple et le plus réaliste, qui a été largement utilisé dans la description du mouvement vibratoire de molécules diatomiques. La relation quantique entre l'oscillateur Harmonique q -déformé et le potentiel de Morse a été pris en compte et le modèle $SU(2)$ étendu (potentiel q -Morse) a été mis en évidence [19, 20]. Des représentations analytiques des fonctions thermodynamiques des gaz sur

toute la gamme de températures allant de zéro jusqu'à la limite de dissociation thermique ont suscité beaucoup d'intérêt pour traiter les systèmes diatomiques et polyatomiques. Grâce à la forme exacte de son spectre d'énergie, la fonction de partition vibratoire, a reçu une grande importance pour de nombreux problèmes dans la chimie quantique. Suivant sa définition, la fonction de partition moléculaire vibratoire peut être calculée par une sommation directe sur toutes les vibrations possibles des niveaux d'énergies. De nombreux efforts ont été déployés pour acquérir des expressions explicites de cette fonction pour les modèles d'énergies du potentiel moléculaire pour les molécules diatomiques et polyatomiques : de cette manière, et dans le cas non relativiste, la recherche des fonctions thermodynamiques de certains types de potentiels tels que Morse, Manning-Rosen, Rosen-Morse et de Tiez, à travers la fonction de partition et ses dérivés, était un domaine important des recherches dans la littérature. Strekalov et Jia [23,24], en utilisant la formule de sommation de Poisson, ont trouvé une expression exacte de la fonction de partition de l'oscillateur de Morse. Dans le même contexte, Jia et Wang [24,25] ont calculé les propriétés thermiques de certaines molécules diatomiques pour différents types de potentiels.

Ces dernières années, les effets de la dépendance de la masse des coordonnées sur les solutions des équations d'ondes relativistes et non relativistes ont reçu une grande attention [1], à cause de la large d'applications dans différents domaines, dont on cite, l'étude des semi-conducteurs, [3] dans le domaine électroniques, les puits quantiques des points quantiques (quantum dot) [26], les impuretés dans les cristaux et enfin plusieurs domaines de la physique moderne.

Nous proposons dans ce travail de calculer les propriétés thermodynamiques des molécules diatomiques pour un potentiel de Morse q -déformé, en présence d'une masse dépendante de la position. Nos simulations seront calculer par le biais de la fonction de partition Z en utilisant la formule d'Euler-Maclaurin. L'intérêt porté à ce travail est justifié par l'absence de l'étude des propriétés thermodynamiques en variant les deux paramètres de déformation q et η dans la littérature,

Ce mémoire comporte trois chapitre composés de la façon suivantes : dans le premier, on fait un rappel sur l'équation de Schrödinger en présence d'une masse dépendante de la position. Le deuxième chapitre est consacré aux solutions exactes du potentiel de Morse déformé en présence d'une masse dépendante de la position. Le troisième chapitre donne les résultats concernant les propriétés thermiques de Morse q -déformé en présence d'une masse dépendante de la position. Nous discutons et comontons l'influence de ses paramètres sur ces propriétés . Enfin, nous terminons par une conclusion soulignant les résultats les plus marquants de cette étude.

L'équation de Schrödinger en présence d'une masse dépendante de la position

1.1 Rappel

Dans ce chapitre, nous étudions une particule avec une masse dépendante de la position (Position-dependent masses PDM) [22]. Nous commençons par l'opérateur d'énergie cinétique dans lequel les conditions physiques sont considérés et nous montrons que la forme générale de l'opérateur d'énergie cinétique brise l'invariance de l'équation de Schrödinger sous la transformation galiléenne global [27-29].

La particule possédant une masse dépendante de la position (*PDM*) a été considérée pour la première fois dans l'étude des semi-conducteurs [1] [30]: au début, le problème était comment réécrire l'opérateur d'énergie cinétique pour une particule dont la masse dépendant de la position. Pour une particule unidimensionnelle, on utilise l'énergie cinétique de la mécanique classique dont

$$\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m_0}, \quad (1.1)$$

où l'opérateur d'impulsion est donné par

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (1.2)$$

En présence de **PDM**, ce dernier ne peut pas être écrit comme

$$\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m(x)}. \quad (1.3)$$

En raison de la dépendance de la masse avec la position, Von-Roos [1] est arrivé à une expression de l'opérateur d'énergie cinétique générale sous la forme suivante

$$\hat{T} = \frac{1}{4} (m^\alpha \hat{p} m^\beta \hat{p} m^\gamma + m^\gamma \hat{p} m^\beta \hat{p} m^\alpha), \quad (1.4)$$

où α, β et γ sont des nombres réels satisfaisant la contrainte suivante

$$\alpha + \beta + \gamma = -1. \quad (1.5)$$

Avec ces condition, l'Eq. (1.4) devient

$$\hat{T} = \hat{P} \frac{1}{2m} \hat{P} + U_{\alpha\gamma}(x), \quad (1.6)$$

dont

$$U_{\alpha\gamma}(x) = \frac{1}{2}(\alpha + \gamma + \alpha\gamma) \frac{m'^2}{m^3} - \frac{1}{4}(\alpha + \gamma) \frac{m''}{m^2}. \quad (1.7)$$

Il a été démontré que si $\alpha = \gamma$ [27, 31], les valeurs propres de l'Hamiltonien, pour des potentiels exactes, divergent. Néanmoins, le seule cas dont le terme cinétique s'écrit par

$$\hat{T} = \hat{P} \frac{1}{2m} \hat{P}. \quad (1.8)$$

donne un spectre fini réelle pour un choix de $\alpha = \gamma = 0$ [1].

1.2 Invariance galiléenne

La forme générale de l'équation de Schrödinger pour un PDM est donnée par

$$\hat{H}\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}, \quad (1.9)$$

dont

$$\hat{H} = \hat{P} \frac{1}{2m(x)} \hat{P} + W(x), \quad (1.10)$$

avec $W(x) = U(x) + V(x)$. Ici, $V(x)$ est le potentiel d'interaction et $\Psi(x, t)$ est la fonction d'onde.

En premier lieu, nous allons montrer que l'équation (1.9) est invariante sous la transformation galiléenne. On définit la transformation galiléenne par le système d'équations ci-dessous

$$\begin{cases} x & = x' + vt', \\ \Delta t = t' - t & = 0, \end{cases} \quad (1.11)$$

où les deux observables x et x' à $t' = t = 0$ ont le même origine. En utilisant le système (1.11) ou les transformations reliant le repère fixe et mobile

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x'}, \quad (1.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t'} - v \frac{\partial}{\partial x'}, \quad (1.13)$$

l'équation de Schrödinger (1.9) devient

$$\left\{ \hat{P}' \frac{1}{2m(x')} \hat{P}' + W(x') \right\} \Psi(x', t') = -i\hbar v \frac{\partial \Psi(x', t')}{\partial x'} + i\hbar \frac{\partial \Psi(x', t')}{\partial t'}. \quad (1.14)$$

Ici, v denote la vitesse du repère mobile par rapport au repère fixe. Dans le but d'avoir une équation de Schrödinger invariante sous les transformations Galiléenne, $H\psi = E\psi \Rightarrow H\psi' = E\psi'$, il faut éliminer le terme supplémentaire, $-i\hbar v \frac{\partial \Psi(x', t')}{\partial x'}$.

Pour vérifier cette condition, nous considérons la fonction d'onde sous la forme suivante,

$$\Psi(x', t') = \exp(i\Lambda(x', t'))\varphi(x', t'). \quad (1.15)$$

Injectons (1.15) dans (1.14), on trouve

$$\left(-\hbar^2 \partial_{x'} \frac{1}{2m(x')} \partial_{x'} + W(x')\right) e^{(i\Lambda)} \varphi = -i\hbar v \frac{\partial e^{(i\Lambda)} \varphi}{\partial x'} + i\hbar \frac{\partial e^{(i\Lambda)} \varphi}{\partial t'}. \quad (1.16)$$

Après un calcul direct, (1.16) se transforme à

$$\begin{aligned} & -\hbar^2 \partial_{x'} \frac{1}{2m(x')} \left(\partial_{x'} e^{(i\Lambda)} \varphi\right) + W(x') e^{(i\Lambda)} \varphi = \\ & -i\hbar v e^{(i\Lambda)} \left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'}\right) + i\hbar e^{(i\Lambda)} \left(i\Lambda_{t'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial t'}\right), \end{aligned} \quad (1.17)$$

En collectant tous les termes, on obtient

$$\begin{aligned} & -\hbar^2 \partial_{x'} \frac{1}{2m(x')} \left[e^{(i\Lambda)} \left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'}\right) \right] + W(x') e^{(i\Lambda)} \varphi = \\ & -i\hbar v e^{(i\Lambda)} \left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'}\right) + i\hbar e^{(i\Lambda)} \left(i\Lambda_{t'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial t'}\right), \end{aligned} \quad (1.18)$$

ou simplement

$$\begin{aligned} & -\hbar^2 \partial_{x'} \left[\frac{e^{(i\Lambda)}}{2m(x')} \left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'}\right) \right] + W(x') e^{(i\Lambda)} \varphi = \\ & -i\hbar v e^{(i\Lambda)} \left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'}\right) + i\hbar e^{(i\Lambda)} \left(i\Lambda_{t'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial t'}\right). \end{aligned} \quad (1.19)$$

Encore plus d'expansions mènent à

$$\begin{aligned} & -\hbar^2 \left[\left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'}\right) \partial_{x'} \left(\frac{e^{(i\Lambda)}}{2m(x')}\right) + \frac{e^{(i\Lambda)}}{2m(x')} \partial_{x'} \left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'}\right) \right] + W(x') e^{(i\Lambda)} \varphi = \\ & -i\hbar v e^{(i\Lambda)} \left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'}\right) + i\hbar e^{(i\Lambda)} \left(i\Lambda_{t'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial t'}\right), \end{aligned} \quad (1.20)$$

et par conséquent

$$\begin{aligned} & -\hbar^2 \left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'}\right) e^{(i\Lambda)} \left(\frac{i\Lambda_{x'}}{2m(x')} - \frac{\partial_{x'} m(x')}{2m(x')^2}\right) + \\ & (-\hbar^2) \frac{e^{(i\Lambda)}}{2m(x')} \left(i\Lambda_{x'x'} \varphi + i\Lambda_{x'} \partial_{x'} \varphi + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'^2}\right) + W(x') e^{(i\Lambda)} \varphi = \\ & -i\hbar v e^{(i\Lambda)} \left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'}\right) + i\hbar e^{(i\Lambda)} \left(i\Lambda_{t'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial t'}\right). \end{aligned} \quad (1.21)$$

Finalement, on trouve

$$\begin{aligned}
& -\hbar^2 \left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right) \left(\frac{i\Lambda_{x'}}{2m(x')} - \frac{\partial_{x'} m(x')}{2m(x')^2} \right) - \\
& \frac{\hbar^2}{2m(x')} \left(i\Lambda_{x'x'} \varphi + i\Lambda_{x'} \partial_{x'} \varphi + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'^2} \right) + W(x') \varphi = \\
& -i\hbar v \left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right) + i\hbar \left(i\Lambda_{t'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial t'} \right).
\end{aligned} \tag{1.22}$$

Si nous soustrayons cette expression de la forme standard de l'équation de schrodinger pour la particule (PDM) c'est-à-dire

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{2m(x')} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'^2} \right) - \frac{\partial_{x'} m(x')}{2m(x')^2} \frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right] + W(x') \varphi = i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t'}. \tag{1.23}$$

Nous trouvons

$$\begin{aligned}
& -\hbar^2 \left[\left(\frac{-\Lambda_{x'}^2 \varphi}{2m(x')} - \frac{\partial_{x'} m(x')}{2m(x')^2} i\Lambda_{x'} \varphi \right) + \frac{i\Lambda_{x'}}{2m(x')} \frac{\partial \varphi}{\partial x'} + \frac{1}{2m(x')} (i\Lambda_{x'x'} \varphi + i\Lambda_{x'} \partial_{x'} \varphi) \right] = \\
& -i\hbar v \left(i\Lambda_{x'} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right) + i\hbar (i\Lambda_{t'} \varphi).
\end{aligned} \tag{1.24}$$

Pour une fonction d'onde générale φ , la séparation de cette dernière équation en deux facteurs par rapport à φ et de $\partial_{x'} \varphi$ rapporte

- pour φ

$$\frac{\hbar^2 \Lambda_{x'}^2}{2m(x')} + \frac{\hbar^2 \partial_{x'} m(x')}{2m(x')^2} i\Lambda_{x'} - \frac{i\hbar^2 \Lambda_{x'x'}}{2m(x')} = \hbar v \Lambda_{x'} - \hbar \Lambda_{t'}. \tag{1.25}$$

- pour $\partial_{x'} \varphi$

$$\frac{\hbar \Lambda_{x'}}{m(x')} = v. \tag{1.26}$$

avec $\Lambda_{x'} = \frac{\partial \Lambda}{\partial x'}$ et $\Lambda_{t'} = \frac{\partial \Lambda}{\partial t'}$. A partir de cette dernière condition, on constate que $\Lambda_{x'}$ est indépendant de t' et donc nous devons écrire

$$\Lambda(x', t') = \Lambda_1(x') + \Lambda_2(t'). \tag{1.27}$$

ainsi l'Eq(1.26) devient pour $\partial_{x'} \varphi$

$$\frac{\hbar}{m(x')} \frac{d\Lambda_1(x')}{dx'} = v, \tag{1.28}$$

ou

$$d\Lambda_1(x') = \frac{v}{\hbar} m(x') dx', \tag{1.29}$$

avec ces conditions l'équation (1.25) se transforme à

$$\frac{\hbar^2}{2m(x')} \left(\frac{vm(x')}{\hbar} \right)^2 + i \frac{\hbar^2 \partial_{x'} m(x')}{2m(x')^2} \frac{vm(x')}{\hbar} - \frac{i\hbar^2}{2m(x')} \partial_{x'} \left(\frac{vm(x')}{\hbar} \right) = \hbar v \frac{vm(x')}{\hbar} - \hbar \Lambda_{t'}. \tag{1.30}$$

Après une simplification on abouti à

$$\frac{v^2 m(x')}{2} = \hbar \Lambda_{t'}, \tag{1.31}$$

donc

$$\frac{d}{dt'} \Lambda_2(t') = \frac{m(x')v^2}{2\hbar}. \quad (1.32)$$

Cette dernière équation est seulement possible si $m(x')$ est constante par rapport à la position : c-à-d, $m(x') = m_0$ donc

$$\Lambda_1(x') = \frac{v}{\hbar} m_0 x'. \quad (1.33)$$

$$\Lambda_2(t') = \frac{m_0 v^2}{2\hbar} t'. \quad (1.34)$$

ces relations permettent d'avoir l'expression de la fonction d'onde d'une particule de masse constante

$$\Psi(x', t') = \exp\left(i\left(\frac{v}{\hbar} m_0 x' + \frac{m_0 v^2}{2\hbar} t'\right)\right) \varphi(x', t'). \quad (1.35)$$

Donc, l'équation de Schrödinger est invariante sous la transformation galiléenne seulement pour les particules de masse constantes.

1.3 Invariance galiléenne instantanée

Nous avons montré que l'équation de Schrödinger pour une particule avec une masse dépendante de position est variante sous la transformation Galiléenne. Dans cette section, nous montrons qu'il existe des cas où l'équation de Schrödinger pour une particule avec une masse dépendante de position peut être invariante pour des transformats galiléenne instantané. Notez que dans le calcul suivant, nous considérons $\hbar = 1$

1.3.1 IGI pour une particule quantique unidimensionnelle avec une masse constante

Pour une particule unidimensionnelle de masse (m), la transformation galiléenne appliquée à t_0 est donné par

$$x'(t) = x(t) - u[t - t_0], \quad (1.36)$$

et

$$p'(t) = p(t) - mu, \quad (1.37)$$

où u est la vitesse du repère mobile. Une transformation galiléenne instantanée (IGI) appliquée à $t = t_0$ donne

$$x'(t) = x(t), \quad (1.38)$$

et

$$p'(t) = p(t) - mu. \quad (1.39)$$

Maintenant, après avoir connu la forme de (IGI) dans la mécanique classique, nous définissons un opérateur unitaire $\hat{U}(u)$ de transformation qui représente la transformation galiléenne instantanée dans la théorie quantique unidimensionnelle pour une particule de masse constante (m). Le passage de la mécanique classique vers la mécanique quantique permettra de faire les changements suivants

$$\hat{U}(u) \hat{X} \hat{U}^{-1}(u) = \hat{X}, \quad (1.40)$$

et

$$\hat{U}(u) \hat{P} \hat{U}^{-1}(u) = \hat{P} - mu\hat{I}, \quad (1.41)$$

avec \hat{X} et \hat{P} sont des opérateurs canoniques de position et d'impulsion et \hat{I} est l'opérateur d'identité. Ces deux relations donnent un opérateur unitaire de la forme suivante (\hat{U})

$$\hat{U}(u) = \exp(iu\hat{K}). \quad (1.42)$$

Dans cette expressions \hat{K} est le générateur infinitésimal de $\hat{U}(u)$. La satisfaction que l'opérateur $\hat{U}(u)$ soit unitaire impose que \hat{K} soit hermitien c'est-à-dire $\hat{K} = \hat{K}^\dagger$ et donc

$$\hat{U}^{-1}(u) = \exp(-iu\hat{K}). \quad (1.43)$$

L'injection des équations (1.42) et (1.43) dans l'équation (1.40) permet d'avoir l'expression de l'opérateur canonique de position

$$\exp(iu\hat{K}) \hat{X} \exp(-iu\hat{K}) = \hat{X}. \quad (1.44)$$

La simplification de cette équation se fait par l'utilisation de la relation de commutation bien connu en mécanique quantique

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots, \quad (1.45)$$

le résultat trouvé est le suivant

$$\hat{X} + [iu\hat{K}, \hat{X}] + \frac{1}{2!} [iu\hat{K}, [iu\hat{K}, \hat{X}]] + \frac{1}{3!} [iu\hat{K}, [iu\hat{K}, [iu\hat{K}, \hat{X}]]] + \dots = \hat{X}, \quad (1.46)$$

on peut voir clairement que $[iu\hat{K}, \hat{X}] = 0$ par conséquent $[\hat{K}, \hat{X}] = 0$.

Ces conséquences implique que \hat{K} est une fonction de l'opérateur de position \hat{X} , c-à-d

$$\hat{K} = \hat{F}(\hat{X}). \quad (1.47)$$

Maintenant nous appliquons la même formule sur l'équation.(1.45) on obtient

$$\hat{P} + [iu\hat{K}, \hat{P}] + \frac{1}{2!} [iu\hat{K}, [iu\hat{K}, \hat{P}]] + \frac{1}{3!} [iu\hat{K}, [iu\hat{K}, [iu\hat{K}, \hat{P}]]] + \dots = \hat{P} - mu\hat{I}, \quad (1.48)$$

en utilisant les relations de commutation suivantes

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hat{I}, \quad (1.49)$$

$$[\hat{K}, \hat{P}] = [\hat{F}(\hat{X}), \hat{P}] = i \frac{d\hat{F}(\hat{X})}{d\hat{X}}. \quad (1.50)$$

Injectons cette dernière dans l'équation (1.48), on trouve

$$-u \frac{d\hat{F}(\hat{X})}{d\hat{X}} + \frac{1}{2!} \left[iu\hat{K}, -u \frac{d\hat{F}(\hat{X})}{d\hat{X}} \right] + \frac{1}{3!} \left[iu\hat{K}, \left[iu\hat{K}, -u \frac{d\hat{F}(\hat{X})}{d\hat{X}} \right] \right] + \dots = -mu\hat{I}, \quad (1.51)$$

par identification, on dégage l'expression suivante

$$\frac{d\hat{F}(\hat{X})}{d\hat{X}} = m\hat{I}, \quad (1.52)$$

par intégration on trouve

$$\hat{F}(\hat{X}) = m\hat{X} + C\hat{I}, \quad (1.53)$$

où C est une constante d'intégration. Cette constante n'influe pas sur la transformation donnée par l'équation (1.40) ou l'équation (1.41) et donc nous le prenons égale à zéro.

Par conséquent,

$$\hat{K} = \hat{F}(\hat{X}) = m\hat{X}, \quad (1.54)$$

$$\hat{U}(u) = \exp(ium\hat{X}). \quad (1.55)$$

néanmoins, dans la transformation galiléenne habituelle, l'opérateur de vitesse \hat{V} est transformé comme suit

$$\hat{U}(u)\hat{V}\hat{U}^{-1}(u) = \hat{V} - u\hat{I}, \quad (1.56)$$

l'opérateur de vitesse figurant dans cette transformation est lié avec l'Hamiltonien \hat{H} et l'opérateur canonique de position \hat{X} par le comutateur ci-dessous

$$\hat{V} = i[\hat{H}, \hat{X}], \quad (1.57)$$

nous suivant la même méthode pour obtenir la relation entre le générateur infinitésimal \hat{K} et l'opérateur de vitesse \hat{V} . L'utilisation de l'équation (1.45) permet d'avoir:

$$\hat{V} + [iu\hat{K}, \hat{V}] + \frac{1}{2!} [iu\hat{K}, [iu\hat{K}, \hat{V}]] + \frac{1}{3!} [iu\hat{K}, [iu\hat{K}, [iu\hat{K}, \hat{V}]]] + \dots = \hat{V} - u\hat{I}, \quad (1.58)$$

ce qui implique

$$[iu\hat{K}, \hat{V}] = -u\hat{I}, \quad (1.59)$$

et en conséquence

$$[\hat{K}, \hat{V}] = i\hat{I}, \quad (1.60)$$

jusqu'ici nous avons trouvé que $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hat{I}$, $[\hat{X}, \hat{K}] = 0$, $[\hat{K}, \hat{V}] = i\hat{I}$ avec $\hat{K} = m\hat{X}$.

L'équation (1.60) devient alors

$$[m\hat{X}, \hat{V}] = i\hat{I}, \quad (1.61)$$

ou

$$[\hat{X}, m\hat{V}] = i\hat{I}, \quad (1.62)$$

ce qui implique clairement que

$$m\hat{V} = \hat{P} - \hat{A}(\hat{X}), \quad (1.63)$$

où $\hat{A}(\hat{X})$ est juste un opérateur arbitraire en fonction de \hat{X} . En outre, on trouve

$$\begin{aligned} \left[\hat{K}, \hat{H} - \frac{1}{2}m\hat{V}^2 \right] &= \left[\hat{K}, \hat{H} \right] - \left[\hat{K}, \frac{1}{2}m\hat{V}^2 \right] = \\ m \left[\hat{X}, \hat{H} \right] - m \left[\hat{X}, \frac{1}{2}m\hat{V}^2 \right] &= mi\hat{V} - mi\hat{V} = 0, \end{aligned} \quad (1.64)$$

les résultats en haut découlent de l'expression suivante

$$\hat{H} - \frac{1}{2}m\hat{V}^2 = \hat{W}(\hat{X}). \quad (1.65)$$

avec $\hat{W}(\hat{X})$ est un opérateur arbitraire en fonction de \hat{X} .

Combinant l'équation (1.63) et l'équation (1.65), la forme de l'Hamiltonien pour un système quantique unidimensionnel dans une transformation galiléenne instantanée (IGI) est donné par

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\hat{V}^2 + \hat{W}(\hat{X}), \quad (1.66)$$

ou

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{P} - \hat{A}(\hat{X}) \right)^2 + \hat{W}(\hat{X}), \quad (1.67)$$

dans la théorie des champs, $\hat{A}(\hat{X})$ et $\hat{W}(\hat{X})$ sont des potentiels vectoriel et scalaire respectivement. Dans un changement de jauge $\hat{A}(\hat{X}) = 0$, la forme générale de l'Hamiltonien devient

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \hat{W}(\hat{X}) \quad (1.68)$$

cette dernière équation donne un Hamiltonien quantique unidimensionnel invariant par la transformation galiléenne instantanée (IGI).

1.3.2 IGI pour une particule quantique unidimensionnelle avec PDM

Après avoir la forme (IGI) de l'Hamiltonien d'une particule avec une masse constante. nous allons, dans cette section, trouver la forme possible de l'Hamiltonien d'une particule de masse dépendante de la position toujours pour (IGI). Dans ce cas nous définissons un autre opérateur unitaire de transformation $\hat{U}(u) = \exp(iu\hat{K})$ tels que $\hat{K} = \hat{K}^+$ et donc $\hat{U}^{-1}(u) = \exp(-iu\hat{K})$. Les transformations galiléennes temporelles (IGT) sont donnés par

$$\hat{U}(u)\hat{X}\hat{U}^{-1}(u) = \hat{X}, \quad (1.69)$$

et

$$\hat{U}(u)\hat{P}\hat{U}^{-1}(u) = \hat{P} - \hat{M}(\hat{X})u, \quad (1.70)$$

où $\hat{M}(\hat{X})$ est l'opérateur de PDM de la particule. Comme nous avons montré ci-dessus

$$\hat{K} = \hat{F}(\hat{X}), \quad (1.71)$$

nous appliquons la relation (1.45) mais cette fois ci on tient compte de la dépendance de la masse de la position. Le calcul nous donne les équations suivantes

$$\hat{P} + [iu\hat{K}, \hat{P}] + \frac{1}{2!} [iu\hat{K}, [iu\hat{K}, \hat{P}]] + \frac{1}{3!} [iu\hat{K}, [iu\hat{K}, [iu\hat{K}, \hat{P}]]] + \dots = \hat{P} - \hat{M}(\hat{X})u, \quad (1.72)$$

par identification, on trouve

$$[iu\hat{K}, \hat{P}] = -\hat{M}(\hat{X})u, \quad (1.73)$$

$$[\hat{P}, \hat{K}] = -i\hat{M}(\hat{X}), \quad (1.74)$$

En remplaçant le générateur inféinitésimal par sa définition conduit à

$$[\hat{P}, \hat{F}(\hat{X})] = -i\hat{M}(\hat{X}), \quad (1.75)$$

ou

$$\frac{d\hat{F}(\hat{X})}{d\hat{X}} = \hat{M}(\hat{X}), \quad (1.76)$$

nous rappelons que l'opérateur de vitesse défini par l'équation (1.57) ainsi que la transformation galiléenne habituelle donnée par l'équation (1.56) donnent $[\hat{K}, \hat{V}] = i\hat{I}$.

Une combinaison des équations (1.60) et (1.57) conduit à

$$[\hat{K}, [\hat{H}, \hat{X}]] = \hat{I}, \quad (1.77)$$

ou d'une manière équivalente

$$[\hat{F}(\hat{X}), [\hat{H}, \hat{X}]] = \hat{I}, \quad (1.78)$$

par l'utilisation de l'identité de jacobi

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0, \quad (1.79)$$

on peut écrire

$$[\hat{F}(\hat{X}), [\hat{H}, \hat{X}]] + [\hat{H}, [\hat{X}, \hat{F}(\hat{X})]] + [\hat{X}, [\hat{F}(\hat{X}), \hat{H}]] = 0, \quad (1.80)$$

nous avons défini précédemment que $[\hat{X}, \hat{F}(\hat{X})] = 0$, la simplification de l'équation (1.80) mène à

$$[\hat{F}(\hat{X}), [\hat{H}, \hat{X}]] = -[\hat{X}, [\hat{F}(\hat{X}), \hat{H}]], \quad (1.81)$$

à partir de l'équation (1.78) on trouve

$$[\hat{X}, [\hat{F}(\hat{X}), \hat{H}]] = -\hat{I}, \quad (1.82)$$

cette commutation signifie simplement que

$$[\hat{F}(\hat{X}), \hat{H}] = i(\hat{P} - \hat{A}(\hat{X})), \quad (1.83)$$

où $\hat{A}(\hat{X})$ est un opérateur arbitraire en fonction de X . Ce dernier s'identifie par un potentiel vecteur qu'on peut l'éliminer par un changement de jauge. En conséquence, l'Hamiltonien d'une particule avec (PDM) dans la théorie quantique unidimensionnelle doit satisfaire

$$\left[\hat{F}(\hat{X}), \hat{H} \right] = i\hat{P}, \quad (1.84)$$

notons que

$$\hat{F}(\hat{X}) = \hat{K} = \int \hat{M}(\hat{X}) d\hat{X}, \quad (1.85)$$

à partir de l'équation (1.84) on peut conclure que si $\hat{H} = \hat{H}_0$ ou pour des Hamiltoniens \hat{H} tels que $\hat{H} - \hat{H}_0 = \hat{W}(\hat{X})$, $\hat{W}(\hat{X})$ représente le potentiel scalaire et \hat{H}_0 est l'Hamiltonien du système libre.

Le prochain but est de déterminer l'expression de l'Hamiltonien d'une particule libre avec (PDM) et l'équation trouvée est la suivante

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{4} \left(\hat{M}^\alpha \hat{P} \hat{M}^\beta \hat{P} \hat{M}^\gamma + \hat{M}^\gamma \hat{P} \hat{M}^\beta \hat{P} \hat{M}^\alpha \right), \quad (1.86)$$

utilisons la condition (1.84) dans l'équation (1.86) on trouve

$$\left[\hat{F}(\hat{X}), \frac{1}{4} \left(\hat{M}^\alpha \hat{P} \hat{M}^\beta \hat{P} \hat{M}^\gamma + \hat{M}^\gamma \hat{P} \hat{M}^\beta \hat{P} \hat{M}^\alpha \right) \right] = i\hat{P}, \quad (1.87)$$

ayant trouvé à partir des équations (1.6) et (1.7) l'expression de l'opérateur d'énergie cinétique ainsi que le potentiel $\hat{U}_{\alpha\gamma}(\hat{X})$, la dernière équation devient

$$\left[\hat{F}(\hat{X}), \hat{P} \frac{1}{2\hat{M}} \hat{P} + \hat{U}_{\alpha\gamma}(\hat{X}) \right] = i\hat{P}, \quad (1.88)$$

simplifiée par

$$\left[\hat{F}(\hat{X}), \hat{P} \frac{1}{2\hat{M}} \hat{P} \right] = i\hat{P}, \quad (1.89)$$

en raison de la commutation suivante $\left[\hat{F}(\hat{X}), U_{\alpha\gamma}(x) \right] = 0$, le côté gauche de l'équation (1.89) s'exprime par

$$\left[\hat{F}(\hat{X}), \hat{P} \frac{1}{2\hat{M}} \hat{P} \right] = \hat{P} \left[\hat{F}(\hat{X}), \frac{1}{2\hat{M}} \hat{P} \right] + \left[\hat{F}(\hat{X}), \hat{P} \frac{1}{2\hat{M}} \right] \hat{P} \quad (1.90)$$

$$\left[\hat{F}(\hat{X}), \hat{P} \frac{1}{2\hat{M}} \hat{P} \right] =$$

$$\hat{P} \left(\frac{1}{2\hat{M}} \left[\hat{F}(\hat{X}), \hat{P} \right] + \left[\hat{F}(\hat{X}), \frac{1}{2\hat{M}} \right] \hat{P} \right) + \left(\hat{P} \left[\hat{F}(\hat{X}), \frac{1}{2\hat{M}} \right] + \left[\hat{F}(\hat{X}), \hat{P} \right] \frac{1}{2\hat{M}} \right) \hat{P}, \quad (1.91)$$

finalemet

$$\left[\hat{F}(\hat{X}), \hat{P} \frac{1}{2\hat{M}} \hat{P} \right] = \hat{P} \left(\frac{1}{2\hat{M}} \left[\hat{F}(\hat{X}), \hat{P} \right] \right) + \left(\left[\hat{F}(\hat{X}), \hat{P} \right] \frac{1}{2\hat{M}} \right) \hat{P}, \quad (1.92)$$

ou

$$\left[\hat{F}(\hat{X}), \hat{P} \frac{1}{2\hat{M}} \hat{P} \right] = \hat{P} \left(\frac{i}{2\hat{M}} \frac{d\hat{F}(\hat{X})}{d\hat{X}} \right) + \left(\frac{d\hat{F}(\hat{X})}{d\hat{X}} \frac{i}{2\hat{M}} \right) \hat{P} = i\hat{P}, \quad (1.93)$$

par le biais de la relation de commutation (1.84), quelque soit les valeurs de α , β et γ figurant dans l'Hamiltonien de von-Roos [1] satisfaisant les deux invariants instantané (IGI) et temporel (IGT), la nouvelle relation recherchée s'écrit par

$$\hat{H} = \frac{1}{4} \left(\hat{M}^\alpha \hat{P} \hat{M}^\beta \hat{P} \hat{M}^\gamma + \hat{M}^\gamma \hat{P} \hat{M}^\beta \hat{P} \hat{M}^\alpha \right) + \hat{V}(\hat{X}) \quad (1.94)$$

$$= \hat{P} \frac{1}{2\hat{M}} \hat{P} + \hat{U}_{\alpha\gamma}(\hat{X}) + \hat{V}(\hat{X}), \quad (1.95)$$

dont l'expression du potentiel dans la transformation galiléenne instantanée (IGI) pour une masse dépendante de la position est

$$\hat{U}_{\alpha\gamma}(\hat{X}) = \frac{1}{2} (\alpha + \gamma + \alpha\gamma) \frac{\hat{M}'^2}{\hat{M}^3} - \frac{1}{4} (\alpha + \gamma) \frac{\hat{M}''}{\hat{M}^2}. \quad (1.96)$$

où les dérivées des masses sont par rapport à \hat{X}

Les solutions exactes du potentiel de Morse déformé en présence d'une masse dépendante de la position

2.1 Rappel

Dans ce chapitre, nous allons étudier les solutions de l'équation de Schrödinger pour un potentiel de Morse déformé avec une masse dépendante de la position d'une forme particulière

2.1.1 La méthode de Nikiforov-Uvarov (NU)

La méthode de Nikiforov-Uvarov (NU) [32] est une puissante méthode utiliser pour résoudre les équations différentielles de deuxième ordre ayant la forme suivante

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1 - \alpha_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{[s(1 - \alpha_3 s)]^2} \right] \psi = 0. \quad (2.1)$$

Dans cette méthode, les solutions propres satisfont les relations ci-dessous

$$\alpha_2 n - (2n + 1) \alpha_5 + (2n + 1) (\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) + n(n - 1) \alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} = 0, \quad (2.2)$$

$$\psi(s) = s^{\alpha_{12}} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - (\alpha_{13}/\alpha_3)} P^{\alpha_{10} - 1, (\alpha_{11}/\alpha_3) - \alpha_{10} - 1} (1 - 2\alpha_3 s). \quad (2.3)$$

Dans la limite $\alpha_3 = 0$, on a

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - (\alpha_{13}/\alpha_3)} = e^{\alpha_{13} s}, \quad (2.4)$$

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - (\alpha_{13}/\alpha_3)} P^{\alpha_{10} - 1, (\alpha_{11}/\alpha_3) - \alpha_{10} - 1} = L_n^{\alpha_{10} - 1}(\alpha_{11} s). \quad (2.5)$$

Prenons en compte les relations en haut, l'expression finale de la fonction d'onde est donc,

$$\psi(s) = s^{\alpha_{12}} e^{\alpha_{13}s} L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11}s), \quad (2.6)$$

dont $L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11}s)$ est le polynome général de Laguerre et α_i sont les constantes de la théorie (NU) défini par

$$\alpha_4 = \frac{1}{2}(1 - \alpha_1), \quad (2.7)$$

$$\alpha_6 = \alpha_5^2 + \xi_1, \quad (2.8)$$

$$\alpha_7 = 2\alpha_4\alpha_5 - \xi_2, \quad (2.9)$$

$$\alpha_8 = \alpha_4^2 + \xi_3, \quad (2.10)$$

$$\alpha_9 = \alpha_3\alpha_7 + \alpha_3^2\alpha_8 + \alpha_6. \quad (2.11)$$

2.1.2 L'équation de Schrödinger pour une masse dépendante de l'espace

L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension [33,34] est exprimé par

$$H\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (2.12)$$

où H est l'hamiltonian d'une particule non relativiste, $\Psi(x)$ est la fonction d'onde et E l'énergie la masse dépend de la position, c'est-à-dire [35]

$$m = m(x), \quad (2.13)$$

donc l'hamiltonien d'une masse dépendante de la position est

$$H = \frac{P^2}{2m(x)} + V(x) + U_{\alpha\beta\gamma}(x), \quad (2.14)$$

où l'opérateur d'impulsion est donné par

$$P = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (2.15)$$

On peut écrire que

$$\frac{P^2}{m(x)} = -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m(x)} \frac{\partial}{\partial x}, \quad (2.16)$$

donc l'équation de Schrödinger s'écrit sous la forme

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m(x)} \frac{\partial}{\partial x} + V(x) + U_{\alpha\beta\gamma}(x) \right\} \Psi(x) = E\Psi(x), \quad (2.17)$$

où

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{1}{m(x)} \right] f = \frac{1}{m(x)} \frac{\partial}{\partial x} f + \left(\frac{1}{m(x)} \right)', \quad (2.18)$$

et de nouveau l'équation de Schrödinger s'écrira sous la forme

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{m'(x)}{m^2(x)} \right\} \frac{\partial}{\partial x} + \{V(x) + U_{\alpha\beta\gamma}(x) - E\} \right) \Psi(x) = 0, \quad (2.19)$$

où $V(x)$ est le potentiel de Morse donné par l'expression [22, 36]

$$V(x) = V_1 \exp(-2\alpha'x) - V_2 \exp(-\alpha'x) \quad (2.20)$$

avec les facteurs pré-exponentielle sont

$$V_1 = D_e, V_2 = 2qD_e, \quad (2.21)$$

où q est le paramètre de déformation et D_e l'énergie de dissociation.

Le calcul du terme cinétique donne l'apparition d'un nouveau terme $U_{\alpha\beta\gamma}$ dont l'expression est

$$U_{\alpha\beta\gamma}(x) = -\frac{\hbar^2}{4m^3(x)(a+1)} \left[(\alpha + \gamma - a) m(x) m''(x) + 2(a - \alpha\gamma - \alpha - \gamma) m'^2(x) \right], \quad (2.22)$$

pour le potentiel nul

$$U_{\alpha\beta\gamma}(x) = 0, \quad (2.23)$$

c'est-à-dire

$$\alpha + \gamma - a = 0, \quad (2.24)$$

et

$$a - \alpha\gamma - \alpha - \gamma = 0, \quad (2.25)$$

donc $\alpha = \gamma = a = 0$, où α, β, γ sont des nombres réelles [37, 38].

Dans le cas d'un potentiel nul, l'équation de Schrödinger est donné par

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{m'(x)}{m^2(x)} \right\} \frac{\partial}{\partial x} + \{V(x) - E\} \right) \Psi(x) = 0. \quad (2.26)$$

Posons que

$$\Psi(x) = \sqrt{m(x)} \Phi(x), \quad (2.27)$$

où

$$\frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} = \frac{m'(x)}{2\sqrt{m(x)}} \Phi(x) + \sqrt{m(x)} \Phi'(x), \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = \left(\frac{2m''(x)m(x) - m'^2(x)}{4m(x)\sqrt{m(x)}} \right) \Phi(x) + \frac{m'(x)}{\sqrt{m(x)}} \Phi'(x) + \sqrt{m(x)} \Phi''(x), \quad (2.29)$$

alors l'équation de Schrödinger devient

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \{U_{eff}(x) - E\} \right) \Phi(x) = 0, \quad (2.30)$$

où $U_{eff}(x)$ est le potentiel effectif donné par la relation [5]

$$U_{eff}(x) = V(x) + \frac{\hbar^2}{4m^2(x)} \left(\frac{3m'(x)}{2m(x)} - m''(x) \right). \quad (2.31)$$

Choisissons la forme suivante de la masse

$$m(x) = \frac{m_0}{(1 - \eta \exp(-\alpha'x))^2}, \quad (2.32)$$

alors

$$m'(x) = \frac{-2\eta\alpha'm_0 \exp(-\alpha'x)}{(1 - \eta \exp(-\alpha'x))^3}, \quad (2.33)$$

$$m''(x) = \frac{2\eta\alpha'^2 m_0 \exp(-\alpha'x)}{(1 - \eta \exp(-\alpha'x))^3} + \frac{6\eta^2 m_0 \alpha'^2 \exp(-2\alpha'x)}{(1 - \eta \exp(-\alpha'x))^4}, \quad (2.34)$$

donc

$$\frac{m'(x)}{m^3(x)} = \frac{4\eta^2 \alpha'^2 \exp(-2\alpha'x)}{m_0}, \quad (2.35)$$

$$\frac{m''(x)}{m^2(x)} = \frac{2\eta\alpha'^2 \exp(-\alpha'x) (1 - \eta \exp(-\alpha'x))}{m_0} + \frac{6\eta^2 \alpha'^2 \exp(-2\alpha'x)}{m_0}. \quad (2.36)$$

A partir des équations (2.9), (2.20), (2.24) et (2.25) on obtient

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2} + \frac{\exp(-\alpha'x)}{(1 - \eta \exp(-\alpha'x))^2} \left\{ \eta\alpha'^2 + \frac{2m_0 V_2}{\hbar^2} \right\} \Phi(x) \\ & + \left[\frac{1}{(1 - \eta \exp(-\alpha'x))^2} \left\{ \left(-\eta^2 \alpha'^2 - \frac{2m_0 V_1}{\hbar^2} \right) \exp(-2\alpha'x) + \frac{2m_0 E}{\hbar^2} \right\} \right] \Phi(x) = 0. \end{aligned} \quad (2.37)$$

En utilisant le changement de variable suivant

$$z = \exp(-\alpha'x), \quad (2.38)$$

la différentiation de la fonction d'onde par rapport x donne

$$\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} = -\alpha' z \frac{\partial \Phi(z)}{\partial z}, \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2} = \alpha'^2 z \frac{\partial \Phi(z)}{\partial z} + \alpha'^2 z^2 \frac{\partial^2 \Phi(z)}{\partial z^2}. \quad (2.40)$$

Ainsi, l'équation de Schrödinger prend la forme [39]

$$\frac{\partial^2 \Phi(z)}{\partial z^2} + \frac{1 - \eta z}{z(1 - \eta z)} \frac{\partial \Phi(z)}{\partial z} + \frac{1}{[z(1 - \eta z)]^2} (-\varepsilon_1 z^2 - \varepsilon_2 z - \varepsilon_{nl}) \Phi(z) = 0, \quad (2.41)$$

où

$$-\varepsilon_1 = -\eta^2 - \frac{2m_0 V_1}{\hbar^2 \alpha'^2}, \quad (2.42)$$

$$-\varepsilon_2 = \eta + \frac{2m_0V_2}{\hbar^2\alpha'^2}, \quad (2.43)$$

$$-\varepsilon_{nl} = \frac{2m_0E}{\hbar^2\alpha'^2}. \quad (2.44)$$

On applique la méthode (NU), l'équation de Schrödinger est la suivante

$$\Phi''(z) + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}\Phi'(z) + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}\Phi(z) = 0, \quad (2.45)$$

où

$$\tilde{\tau}(z) = 1 - \eta z, \quad (2.46)$$

$$\sigma(z) = z(1 - \eta z), \quad (2.47)$$

$$\tilde{\sigma}(z) = -\varepsilon_1 z^2 - \varepsilon_2 z - \varepsilon_{nl}. \quad (2.48)$$

on effectue les changements suivants

$$\lambda_n = -n\tau'(z) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(z), \quad (2.49)$$

où

$$\tau(z) = \tilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \quad (2.50)$$

avec

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}, \quad (2.51)$$

donc

$$\pi(z) = -\frac{\eta z}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\eta^2}{4} - k\eta + \varepsilon_1\right)z^2 + (\varepsilon_2 + k)z + \varepsilon_{nl}}, \quad (2.52)$$

pour le calcul de $\pi(z)$ on pose

$$\left(\frac{\eta^2}{4} - k\eta + \varepsilon_1\right)z^2 + (\varepsilon_2 + k)z + \varepsilon_{nl} = 0, \quad (2.53)$$

la résolution de cette équation passe par le calcul du déterminant

$$\Delta = (\varepsilon_2 + k)^2 - 4\varepsilon_{nl}\left(\frac{\eta^2}{4} - k\eta + \varepsilon_1\right) = 0, \quad (2.54)$$

donc les solutions obtenues sont

$$k_{1,2} = -\varepsilon_2 - 2\eta\varepsilon_{nl} \mp \sqrt{\varepsilon_{nl}}A, \quad (2.55)$$

où

$$A = \sqrt{4\eta^2\varepsilon_{nl} + 4\eta\varepsilon_2 + \eta^2 + 4\varepsilon_1}, \quad (2.56)$$

la condition d'une dérivée négative de $\pi(z)$ par rapport à z permettra de calculer le polynôme $\tau(z)$, nous prenons donc la racine k_2 :

$$k_2 = -\varepsilon_2 - 2\eta\varepsilon_{nl} - \sqrt{\varepsilon_{nl}}A, \quad (2.57)$$

on trouve

$$\pi(z) = -\frac{\eta z}{2} - \left[\left(\frac{A}{2} + \eta\sqrt{\varepsilon_{nl}} \right) z - \sqrt{\varepsilon_{nl}} \right]. \quad (2.58)$$

A partir des équations (2.47) et (2.35) on obtient

$$\tau(z) = 1 + 2\sqrt{\varepsilon_{nl}} - 2 \left(\frac{A}{2} + \eta\sqrt{\varepsilon_{nl}} + \eta \right) z, \quad (2.59)$$

avec la dérivée

$$\tau'(z) = -2 \left(\frac{A}{2} + \eta\sqrt{\varepsilon_{nl}} + \eta \right), \quad (2.60)$$

nous avons

$$\lambda = k_2 + \pi'(z), \quad (2.61)$$

où

$$\pi'(z) = -\frac{\eta}{2} - \left(\frac{A}{2} + \eta\sqrt{\varepsilon_{nl}} \right), \quad (2.62)$$

donc

$$\lambda = -\varepsilon_2 - 2\eta\sqrt{\varepsilon_{nl}} - \sqrt{\varepsilon_{nl}}(A + \eta) - \frac{1}{2}(A + \eta), \quad (2.63)$$

où

$$\sigma''(z) = -2\eta, \quad (2.64)$$

à partir des équation (2.49) et (2.53) on aura

$$\lambda_n = 2n \left(\frac{A}{2} + \eta\sqrt{\varepsilon_{nl}} + \eta \right) + \eta n(n-1), \quad (2.65)$$

pour trouver les valeurs propres, on pose

$$\lambda = \lambda_n, \quad (2.66)$$

on trouve

$$\varepsilon_{nl} = \left\{ \frac{[n^2 + n - \frac{1}{2}] \eta - \varepsilon_2 - 2[n + \frac{1}{2}] \sqrt{\varepsilon_1 - \frac{\eta^2}{2}}}{(2n+1)\eta - \sqrt{4\varepsilon_1 - 2\eta^2}} \right\}^2. \quad (2.67)$$

A partir des équation (2.33) et (2.31) le spectre d'énergie d'une masse dépendante de la position figure dans l'équation ci-dessous

$$E_n = -\frac{\alpha'^2 \hbar^2}{2m_0} \left\{ \frac{[n^2 + n - \frac{1}{2}] \eta - \varepsilon_2 - 2[n + \frac{1}{2}] \sqrt{\eta^2 + \frac{2m_0 V_1}{\hbar^2 \alpha'^2} - \frac{\eta^2}{2}}}{(2n+1)\eta - 2\sqrt{\eta^2 + \frac{2m_0 V_1}{\hbar^2 \alpha'^2} - \frac{\eta^2}{2}}} \right\}^2, \quad (2.68)$$

dont les nombres quantiques $n_{div} = \frac{\sqrt{\gamma^2 + \frac{2m_0 V_1}{\hbar^2 \alpha'^2} - \frac{\gamma^2}{2}}}{\gamma} - \frac{1}{2}$ dénote la divergence de notre spectre et n_{max} donne la valeur maximale de l'énergie. Ce nombre quantique se calcul à partir de l'équation $\frac{dE}{dn} = 0$, où on

Tab. 2.1 : Paramètres spectroscopiques

	m (u.m.a)	α' (Å^{-1})	D_e (eV)
<i>H2</i>	$0.5 \times 931.5 \times 10^6$	1.440558	4.7446
<i>CO</i>	$6.8606719 \times 931.5 \times 10^6$	2.59441	11.2255
<i>HCl</i>	$0.9801045 \times 931.5 \times 10^6$	2.38057	4.61907
<i>LiH</i>	$0.8801221 \times 931.5 \times 10^6$	1.7998368	2.515287

obtient l'équation suivante

$$[n_{max}(q, \eta, \alpha, a, \gamma)] = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1(a, \alpha, \gamma, \eta) - \frac{\eta^2}{2}}}{\eta} - \frac{1}{2} \right] \pm \sqrt{\frac{\left[1 - \frac{2\sqrt{\varepsilon_1(a, \alpha, \gamma, \eta) - \frac{\eta^2}{2}}}{\eta} \right]^2 + 4 \left[\frac{1}{2} + \frac{\varepsilon_2(a, \alpha, \gamma, \eta, q) + \sqrt{\varepsilon_1(a, \alpha, \gamma, \eta) - \frac{\eta^2}{2}}}{\eta} \right]}{2}}. \quad (2.69)$$

avec $\lfloor \cdot \rfloor$ dénote la partie entière de n_{max} . Le signe \pm sera choisi selon le cas de la molécule en considération.

Dans ce qui suit, on va traiter quatre types de molécules *H2*, *CO*, *HCl* et *LiH*. Les différentes caractéristiques de ces molécules sont données dans les Tableaux suivants

Le signe de n_{max} sera choisi négatif¹ avec toujours la condition $n_{max} < n_{div}$ c-à-d, notre spectre d'énergie est continu.

Le Tableau. 2.2 regroupe les valeurs du nombre quantique n_{max} pour le cas où $a = 0$ dans différentes situations. Par contre, le Tableau. 2.3 donne les valeurs du nombre quantique n_{div} correspondant à la divergence de la fonction du spectre d'énergie. Pour le cas où $a \neq 0$ ($U_{\alpha\beta\gamma} \neq 0$), les valeurs de n_{max} et n_{div} sont données dans le Tableau 2.1. selon Weyl et al.

1. le signe positif de n_{max} donne lieu à des valeurs complexes

Tab. 2.2 : Valeurs du nombre quantique n_{max} : $a = 0$ ($U_{\alpha\beta\gamma} = 0$) pour la molécule H_2 (ا) Roos et al [1] ($a = \alpha = \gamma = 0$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	25.855	22.885	20.006	17.211	14.493	11.845
0.4	31.816	27.026	22.885	19.183	15.805	12.679
0.6	\	\	30.669	22.883	17.851	13.826

(ب) Zhu et al [2] ($a = 0, \alpha = \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	25.851	22.881	20.002	17.207	14.488	11.84
0.4	31.807	27.018	22.876	19.175	15.797	12.67
0.6	\	\	30.657	22.87	17.838	13.813

(ج) Gora et al [3] ($a = \gamma = 0, \alpha = -1$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	25.852	22.882	20.003	17.208	14.489	11.841
0.4	31.818	27.025	22.882	19.179	15.8	12.673
0.6	\	\	30.708	22.889	17.85	13.821

(د) Li et al [4] ($a = \alpha = 0, \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	25.854	22.883	20.005	17.209	14.491	11.843
0.4	31.817	27.026	22.884	19.181	15.803	12.676
0.6	\	\	30.689	22.886	17.85	13.823

Tab. 2.3 : Valeurs du nombre quantique n_{div} pour la molécule H_2 (l) Roos et al [1] ($a = \alpha = \gamma = 0$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	116.423	116.423	116.423	116.423	116.423	116.423
0.4	57.965	57.965	57.965	57.965	57.965	57.965
0.6	38.48	38.48	38.48	38.48	38.48	38.48

(ب) Zhu et al [2] ($a = 0, \alpha = \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	116.419	116.419	116.419	116.419	116.419	116.419
0.4	57.956	57.956	57.956	57.956	57.956	57.956
0.6	38.467	38.467	38.467	38.467	38.467	38.467

(ج) Gora et al [3] ($a = \gamma = 0, \alpha = -1$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	116.415	116.415	116.415	116.415	116.415	116.415
0.4	57.948	57.948	57.948	57.948	57.948	57.948
0.6	38.454	38.454	38.454	38.454	38.454	38.454

(د) Li et al [4] ($a = \alpha = 0, \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	116.419	116.419	116.419	116.419	116.419	116.419
0.4	57.956	57.956	57.956	57.956	57.956	57.956
0.6	38.467	38.467	38.467	38.467	38.467	38.467

Tab. 2.4 : Valeurs du nombre quantique n_{max} et $n_{div} : a \neq 0 (U_{\alpha\beta\gamma} \neq 0)$ pour la molécule H_2

(أ) Weyl et al [5] : n_{max}

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	25.854	22.883	20.005	17.209	14.491	11.843
0.4	31.817	27.026	22.884	19.181	15.803	12.676
0.6	\	\	30.689	22.886	17.85	13.823

(ب) Weyl et al [5] : n_{div}

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	116.419	116.419	116.419	116.419	116.419	116.419
0.4	57.956	57.956	57.956	57.956	57.956	57.956
0.6	38.467	38.467	38.467	38.467	38.467	38.467

Tab. 2.5 : Valeurs du nombre quantique n_{max} : $a = 0$ ($U_{\alpha\beta\gamma} = 0$) pour la molécule CO(l) Roos et al [1] ($a = \alpha = \gamma = 0$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	82.877	73.481	64.373	55.53	46.929	38.552
0.4	101.738	86.584	73.481	61.769	51.081	41.189
0.6	\	\	98.138	73.48	57.556	44.819

(ب) Zhu et al [2] ($a = 0, \alpha = \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	82.876	73.479	64.372	55.529	46.928	38.551
0.4	101.736	86.582	73.478	61.766	51.079	41.186
0.6	\	\	98.133	73.476	57.552	44.815

(ج) Gora et al [3] ($a = \gamma = 0, \alpha = -1$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	82.876	73.48	64.372	55.529	46.928	38.551
0.4	101.739	86.584	73.48	61.767	51.08	41.187
0.6	\	\	98.15	73.482	57.556	44.817

(د) Li et al [4] ($a = \alpha = 0, \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	82.877	73.48	64.373	55.529	46.929	38.551
0.4	101.739	86.584	73.48	61.768	51.081	41.188
0.6	\	\	98.144	73.481	57.556	44.818

Tab. 2.6 : Valeurs du nombre quantique n_{div} pour la molécule CO(l) Roos et al [1] ($a = \alpha = \gamma = 0$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	369.403	369.403	369.403	369.403	369.403	369.403
0.4	184.452	184.452	184.452	184.452	184.452	184.452
0.6	122.803	122.803	122.803	122.803	122.803	122.803

(ب) Zhu et al [2] ($a = 0, \alpha = \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	369.401	369.401	369.401	369.401	369.401	369.401
0.4	184.45	184.45	184.45	184.45	184.45	184.45
0.6	122.799	122.799	122.799	122.799	122.799	122.799

(ج) Gora et al [3] ($a = \gamma = 0, \alpha = -1$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	369.4	369.4	369.4	369.4	369.4	369.4
0.4	184.447	184.447	184.447	184.447	184.447	184.447
0.6	122.795	122.795	122.795	122.795	122.795	122.795

(د) Li et al [4] ($a = \alpha = 0, \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	369.401	369.401	369.401	369.401	369.401	369.401
0.4	184.45	184.45	184.45	184.45	184.45	184.45
0.6	122.799	122.799	122.799	122.799	122.799	122.799

Tab. 2.7 : Valeurs du nombre quantique n_{max} et n_{div} : $a \neq 0$ ($U_{\alpha\beta\gamma} \neq 0$) pour la molécule CO

(أ) Weyl et al [5] : n_{max}

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	82.877	73.48	64.373	55.529	46.929	38.551
0.4	101.739	86.584	73.48	61.768	51.081	41.188
0.6	\	\	98.144	73.481	57.556	44.818

(ب) Weyl et al [5] : n_{div}

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	369.401	369.401	369.401	369.401	369.401	369.401
0.4	184.45	184.45	184.45	184.45	184.45	184.45
0.6	122.799	122.799	122.799	122.799	122.799	122.799

Tab. 2.8 : Valeurs du nombre quantique n_{max} : $a = 0$ ($U_{\alpha\beta\gamma} = 0$) pour la molécule HCl(ا) Roos et al [1] ($a = \alpha = \gamma = 0$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	21.532	19.049	16.643	14.306	12.033	9.82
0.4	26.514	22.511	19.049	15.955	13.131	10.517
0.6	\	\	25.552	19.046	14.841	11.476

(ب) Zhu et al [2] ($a = 0, \alpha = \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	21.527	19.044	16.637	14.301	12.028	9.815
0.4	26.504	22.5	19.039	15.944	13.121	10.507
0.6	\	\	25.537	19.031	14.825	11.461

(ج) Gora et al [3] ($a = \gamma = 0, \alpha = -1$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	21.528	19.045	16.638	14.302	12.029	9.815
0.4	26.516	22.51	19.045	15.95	13.125	10.51
0.6	\	\	25.599	19.054	14.839	11.47

(د) Li et al [4] ($a = \alpha = 0, \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	21.53	19.047	16.641	14.304	12.031	9.818
0.4	26.515	22.51	19.047	15.952	13.128	10.514
0.6	\	\	25.576	19.05	14.84	11.473

Tab. 2.9 : Valeurs du nombre quantique n_{div} pour la molécule HCl(ا) Roos et al [1] ($a = \alpha = \gamma = 0$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	97.242	97.242	97.242	97.242	97.242	97.242
0.4	48.375	48.375	48.375	48.375	48.375	48.375
0.6	32.088	32.088	32.088	32.088	32.088	32.088

(ب) Zhu et al [2] ($a = 0, \alpha = \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	97.237	97.237	97.237	97.237	97.237	97.237
0.4	48.365	48.365	48.365	48.365	48.365	48.365
0.6	32.072	32.072	32.072	32.072	32.072	32.072

(ج) Gora et al [3] ($a = \gamma = 0, \alpha = -1$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	97.232	97.232	97.232	97.232	97.232	97.232
0.4	48.355	48.355	48.355	48.355	48.355	48.355
0.6	32.057	32.057	32.057	32.057	32.057	32.057

(د) Li et al [4] ($a = \alpha = 0, \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	97.237	97.237	97.237	97.237	97.237	97.237
0.4	48.365	48.365	48.365	48.365	48.365	48.365
0.6	32.072	32.072	32.072	32.072	32.072	32.072

Tab. 2.10 : Valeurs du nombre quantique n_{max} et n_{div} : $a \neq 0$ ($U_{\alpha\beta\gamma} \neq 0$) pour la molécule HCl

(أ) Weyl et al [5] : n_{max}

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	21.53	19.047	16.641	14.304	12.031	9.818
0.4	26.515	22.51	19.047	15.952	13.128	10.514
0.6	\	\	25.576	19.05	14.84	11.473

(ب) Weyl et al [5] : n_{div}

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	97.237	97.237	97.237	97.237	97.237	97.237
0.4	48.365	48.365	48.365	48.365	48.365	48.365
0.6	32.072	32.072	32.072	32.072	32.072	32.072

Tab. 2.11 : Valeurs du nombre quantique $n_{max} : a = 0$ ($U_{\alpha\beta\gamma} = 0$) pour la molécule LiH(ا) Roos et al [1] ($a = \alpha = \gamma = 0$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	19.878	17.581	15.355	13.194	11.092	9.045
0.4	24.485	20.783	17.581	14.719	12.108	9.69
0.6	\	\	23.594	17.578	13.689	10.577

(ب) Zhu et al [2] ($a = 0, \alpha = \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	19.872	17.576	15.35	13.189	11.087	9.04
0.4	24.474	20.772	17.57	14.708	12.097	9.679
0.6	\	\	23.578	17.561	13.672	10.561

(ج) Gora et al [3] ($a = \gamma = 0, \alpha = -1$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	19.874	17.577	15.351	13.19	11.088	9.04
0.4	24.488	20.782	17.577	14.714	12.101	9.682
0.6	\	\	23.644	17.586	13.687	10.57

(د) Li et al [4] ($a = \alpha = 0, \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	19.876	17.579	15.353	13.192	11.09	9.043
0.4	24.487	20.782	17.579	14.716	12.104	9.686
0.6	\	\	23.619	17.582	13.688	10.574

Tab. 2.12 : Valeurs du nombre quantique n_{div} pour la molécule LiH(l) Roos et al [1] ($a = \alpha = \gamma = 0$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	89.903	89.903	89.903	89.903	89.903	89.903
0.4	44.706	44.706	44.706	44.706	44.706	44.706
0.6	29.642	29.642	29.642	29.642	29.642	29.642

(ب) Zhu et al [2] ($a = 0, \alpha = \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	89.898	89.898	89.898	89.898	89.898	89.898
0.4	44.695	44.695	44.695	44.695	44.695	44.695
0.6	29.625	29.625	29.625	29.625	29.625	29.625

(ج) Gora et al [3] ($a = \gamma = 0, \alpha = -1$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	89.892	89.892	89.892	89.892	89.892	89.892
0.4	44.684	44.684	44.684	44.684	44.684	44.684
0.6	29.609	29.609	29.609	29.609	29.609	29.609

(د) Li et al [4] ($a = \alpha = 0, \gamma = -\frac{1}{2}$)

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	89.898	89.898	89.898	89.898	89.898	89.898
0.4	44.695	44.695	44.695	44.695	44.695	44.695
0.6	29.625	29.625	29.625	29.625	29.625	29.625

Tab. 2.13 : Valeurs du nombre quantique n_{max} et n_{div} : $a \neq 0$ ($U_{\alpha\beta\gamma} \neq 0$) pour la molécule LiH

(أ) Weyl et al [5] : n_{max}

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	19.876	17.579	15.353	13.192	11.09	9.043
0.4	24.487	20.782	17.579	14.716	12.104	9.686
0.6	\	\	23.619	17.582	13.688	10.574

(ب) Weyl et al [5] : n_{div}

η	q=1	q=0.9	q=0.8	q=0.7	q=0.6	q=0.5
0.2	89.898	89.898	89.898	89.898	89.898	89.898
0.4	44.695	44.695	44.695	44.695	44.695	44.695
0.6	29.625	29.625	29.625	29.625	29.625	29.625

Les propriétés thermodynamiques du potentiel de Morse déformé via l'approche d'Euler-Maclaurin

3.1 Les propriétés thermodynamiques

La simulation des propriétés thermodynamiques de notre problème en question se fait par la détermination de la fonction de partition. Dans notre cas nous proposons d'étudier cette fonction pour quatre type de molécules H_2 , CO , HCl et LiH . L'accent sera mis sur l'étude de l'influence de la déformation ainsi que l'effet de la dépendance de la masse avec la position sur les quantité thermodynamiques.

3.1.1 L'approche d'Euler-Maclaurin

La fonction de partition Z est définie par

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}, \quad (3.1)$$

où $\beta = \frac{1}{k_B T}$, avec k_B est la constante de Boltzmann .

L'énergie de Morse unidimensionnelle dépendant de la masse calculée dans le deuxième chapitre (Cf Chapitre 2) s'écrit sous la forme

$$E_n = -\frac{\alpha'^2 \hbar^2}{2m_0} \left\{ \frac{[n^2 + n - \frac{1}{2}] \eta - \varepsilon_2 - 2 [n + \frac{1}{2}] \sqrt{\eta^2 + \frac{2m_0 V_1}{\hbar^2 \alpha'^2} - \frac{\eta^2}{2}}}{(2n + 1) \eta - 2 \sqrt{\eta^2 + \frac{2m_0 V_1}{\hbar^2 \alpha'^2} - \frac{\eta^2}{2}}} \right\}^2, \quad (3.2)$$

avec

$$-\varepsilon_1 = -\eta^2 - \frac{2m_0 V_1}{\hbar^2 \alpha'^2}, \quad -\varepsilon_2 = \eta + \frac{2m_0 V_2}{\hbar^2 \alpha'^2}. \quad (3.3)$$

Par la substitution de l'équation (3.2) dans l'équation (3.1), on obtient la fonction de partition

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{\beta \frac{\alpha'^2 \hbar^2}{2m_0}} \left\{ \frac{[n^2 + n - \frac{1}{2}] \eta - \varepsilon_2 - 2[n + \frac{1}{2}] \sqrt{\eta^2 + \frac{2m_0 V_1}{\hbar^2 \alpha'^2} - \frac{\eta^2}{2}}}{(2n+1)\eta - 2\sqrt{\eta^2 + \frac{2m_0 V_1}{\hbar^2 \alpha'^2} - \frac{\eta^2}{2}}} \right\}^2, \quad (3.4)$$

On transforme notre somme infinie en intégral, puis l'étude de la convergence de notre intégral se fait par l'étude de la convergence de notre série. Le passage de la somme en intégral est examiné par l'utilisation de la formule de la transformation d'Euler Maclaurin [40].

Si on pose que

$$f(x) = e^{\beta \frac{\alpha'^2 \hbar^2}{2m_0}} \left\{ \frac{[n^2 + n - \frac{1}{2}] \eta - \varepsilon_2 - 2[n + \frac{1}{2}] \sqrt{\eta^2 + \frac{2m_0 V_1}{\hbar^2 \alpha'^2} - \frac{\eta^2}{2}}}{(2n+1)\eta - 2\sqrt{\eta^2 + \frac{2m_0 V_1}{\hbar^2 \alpha'^2} - \frac{\eta^2}{2}}} \right\}^2, \quad (3.5)$$

dont $f(x)$ est une fonction positive décroissante, alors la fonction de partition Z converge.

La formule d'Euler-Maclaurin est définie comme suit

$$\sum_{x=0}^{\infty} f(x) = \frac{1}{2}f(0) + \int_0^{\infty} f(x)dx - \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(2p)!} B_{2p} f^{(2p-1)}(0) - R_k, \quad (3.6)$$

dont

$$R_k = \int_0^{\infty} \frac{B_k(1-2p)}{2p!} f^{(2p)} dx, \quad (3.7)$$

est le terme résidu tendant vers zéro pour certaine valeurs de p , B_{2p} sont les nombres de Bernoulli et $f^{(2p-1)}$ sont les dérivées d'ordre $(2p-2)$.

En se limitant à l'ordre $p=2$, on trouve

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(x) = \frac{1}{2}f(0) + \int_0^{\infty} f(x)dx - \frac{1}{2!} B_2 f^{(1)}(0) - \frac{1}{4!} B_4 f^{(3)}(0), \quad (3.8)$$

dont $B_2 = \frac{1}{6}$, $B_4 = -\frac{1}{30}$, $B_6 = \frac{1}{42}$, $B_8 = -\frac{1}{30}$. Dans ce cas, cette somme devient

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} f(x, q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta) &= \frac{1}{2}f(0, q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta) + \int_0^{\infty} f(n, q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta) dx \\ &- \frac{1}{12} f^{(1)}(0, q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta) + \frac{1}{720} f^{(3)}(0, q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta). \end{aligned} \quad (3.9)$$

A partir des équations (3.6) et (3.9), la fonction de partition devient [41]

$$\begin{aligned} Z(q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta) &= \sum_{n=0}^{n_{max}} f(x) = \frac{1}{2}f(0, q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta) + \int_0^{n_{max}} f(x, q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta) dx \\ &- \frac{1}{2!} B_2 f^{(1)}(0, q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta) - \frac{1}{4!} B_4 f^{(3)}(0, q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Les propriétés thermiques comme l'énergie libre, l'énergie totale, l'entropie et la chaleur spécifique seront

déterminées respectivement par la fonction de partition Z via les relations suivantes

$$F(q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta) = -\frac{1}{\beta} \ln \{Z(q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta)\}, \quad (3.11)$$

$$U(q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta) = -\frac{\partial \ln \{Z(q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta)\}}{\partial \beta}, \quad (3.12)$$

$$S(q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta) = \ln \{Z(q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta)\} - \beta \frac{\partial \ln \{Z(q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta)\}}{\partial \beta}, \quad (3.13)$$

$$C_v(q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta) = \beta^2 \frac{\partial^2 \ln \{Z(q, \eta, \alpha, a, \gamma, \beta)\}}{\partial \beta^2}. \quad (3.14)$$

Dans ce qui suit nous présentons tous les résultats obtenus pour les quatre molécules H_2 , CO , HCl et LiH : le choix des quatre molécules est justifié par leur grandes utilisation dans la littérature, exactement dans le domaine de la chimie physique ou la chimie quantique.

Passons maintenant aux discussions de tous les résultats obtenus : notons que

- tous les unités utilisées sont en unité (uma),
- les énergies sont en eV,
- nous nous sommes consacré uniquement aux courbes de la chaleur spécifique car, en générale c'est la quantité accessibles expérimentalement : tous les autres quantités peuvent être obtenues sans aucune difficulté.

Premièrement, on peut voir que tous les figures de la chaleur spécifique des quatre molécules, pour différents choix des paramètres de déformations q et η , ainsi que des paramètres d'ambiguités α , β et γ de la théorie **PDM**, montrent une similitude apparente. Dans ce contexte, nous nous concentrons uniquement à la discussion des résultats concernant la molécule H_2 . Notons ici que nous avons

- varié les deux paramètres de déformations η et q en même temps,
- choisie les paramètres d'ambiguités α , β et γ de la théorie **PDM** à partir des travaux scientifiques dans ce domaines : citons par exemple les travaux de Roos et al [1], Gora et al [3], Zhu et al [2], Li et al [4] pour le cas $a = 0$ et enfin Weyl et al [5] pour le cas $a = 1$ (Cf Chapitre 2) : ainsi pour chaque choix de la valeur a , et les valeurs d'ambiguités α , β et γ , nous avons pu représenter la variation de la chaleur spécifique en fonction de l'inverse de température β en fixant en premier lieu η tout en variant q , puis q tout en variant η comme le montre les figures. 3.1 jusqu'à 3.40

pour les deux cas suivants

- fixant $\eta \in (0.2, 0.4, 0.6)$ tout en variant $q \in (0.5, 0.7, 0.9, 1)$: on aperçoit que tous les figures de la chaleur spécifique en fonction de l'inverse de température β montrent la même allure mais ne coincident pas. A très basses températures, l'annihilation de la chaleur spécifique devient rapide, en augmentant les valeurs de q . Ainsi, l'annihilation de notre système dépend inversement du paramètre de déformation q : physiquement, lorsque $q \rightarrow 1$, on obtient le potentiel de Morse habituel (Cf Chapitre 2, Eq(2.20)), ce qui explique l'annihilation rapide de notre chaleur spécifique : cette annihilation peut être expliquer, à haute température, par la saturation de notre système, et donc y'a pas d'échange en terme d'énergie ($k_B T$) entre notre système et l'environnement (par exemple un bain thermique). Ce qui traduit l'absence d'interaction entre notre système et l'environnement. Contrairement au cas

de l'oscillateur Harmonique, Ce résultat est la conséquence de la limitation des niveaux quantiques alloués dans le cas du potentiel de Morse. Maintenant, à basses températures, on trouve directement la troisième loi thermodynamique

$$\lim_{T \rightarrow 0} C_v = 0,$$

Enfin, les bosses dans les figures de la chaleur spécifique, s'étalent lorsque $\eta \rightarrow 1$, elles se déplacent en augmentant les valeurs de q pour un η fixe. Notons que ces résultats sont les mêmes pour les deux choix de $a = 0$ [1-4] et $a = 1$ [5].

- fixant $q \in (0.2, 0.4, 0.6)$ tout en variant $\eta \in (0.5, 0.7, 0.9, 1)$:
 - l'annihilation, quand $q \rightarrow 1$, est plus rapide dans les deux gammes de températures (hautes et basses),
 - l'absence de déplacement des bosses enregistré sur les figures précédentes tout en signalant l'existence d'une légère différence au voisinage de la bosse,
 - Enfin, on peut étendre l'explication physique obtenue au-dessus à notre cas.
- L'apparition de la bosse dans les courbes de la chaleur spécifique n'indique pas l'existence d'une transition de phase du deuxième ordre selon Landau [42], mais une ré-orientation de spin.

dans le but de tester l'influence des paramètres d'ambiguïtés sur nos simulations, nous avons choisi des valeurs pour α , β et γ à partir de la littérature donnés par différents auteurs [1-4] pour $a = 0$. Nous remarquons que ces paramètres n'influent pas sur les courbes de la chaleur spécifique pour les quatre type de molécules H_2 , CO , HCl et LiH . Pour voir cette influence, on a tracé cette fonction, pour différents choix de ces paramètres, dans une même représentation. Les figures 3.41 jusqu'à 3.43 montrent la variation de la chaleur spécifique en fonction de l'inverse de température β pour différents choix des paramètres d'ambiguïtés α , β et γ [1-4] : d'après ces figures, on peut voir que ces paramètres n'ont aucune influence sur la chaleur spécifique. D'une autre part le changement de ces paramètres donne lieu à des énergies complexes selon la littérature [1].

3.2 La molécule H_2

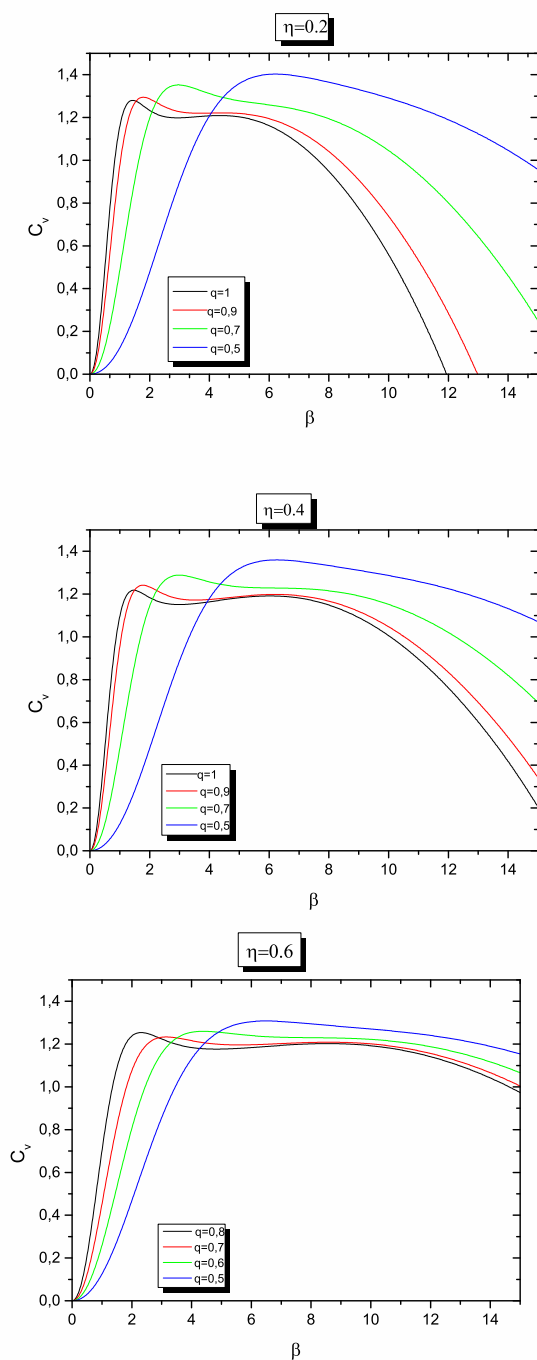


Fig. 3.1 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H_2 selon Roos et al [1] : fixant η et variant q

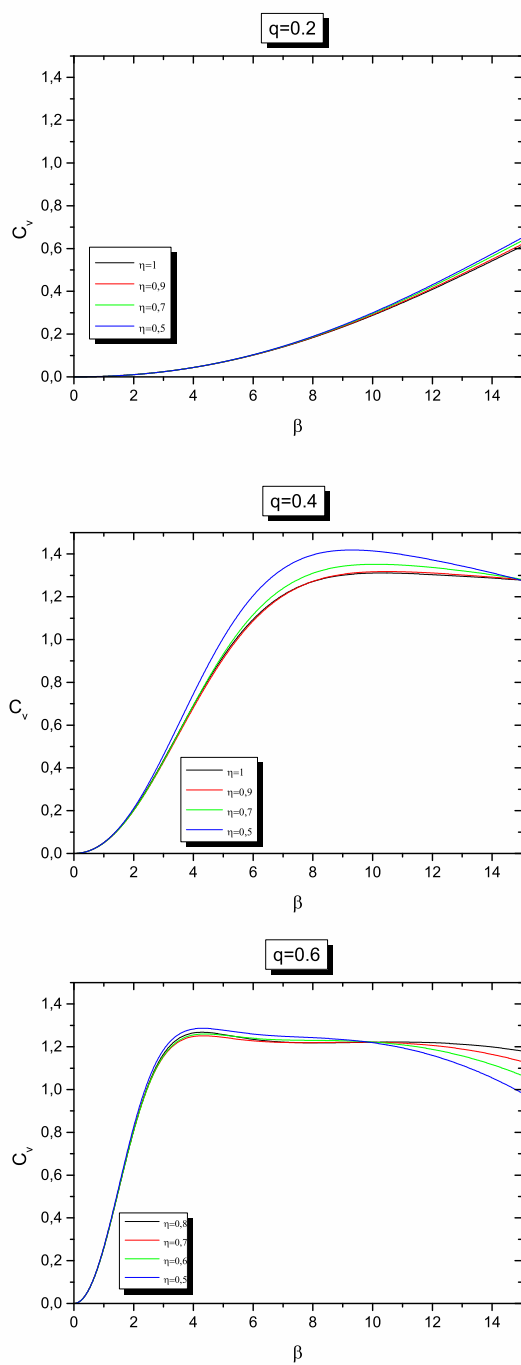


Fig. 3.2 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H_2 selon Roos et al [1] : fixant q et variant η

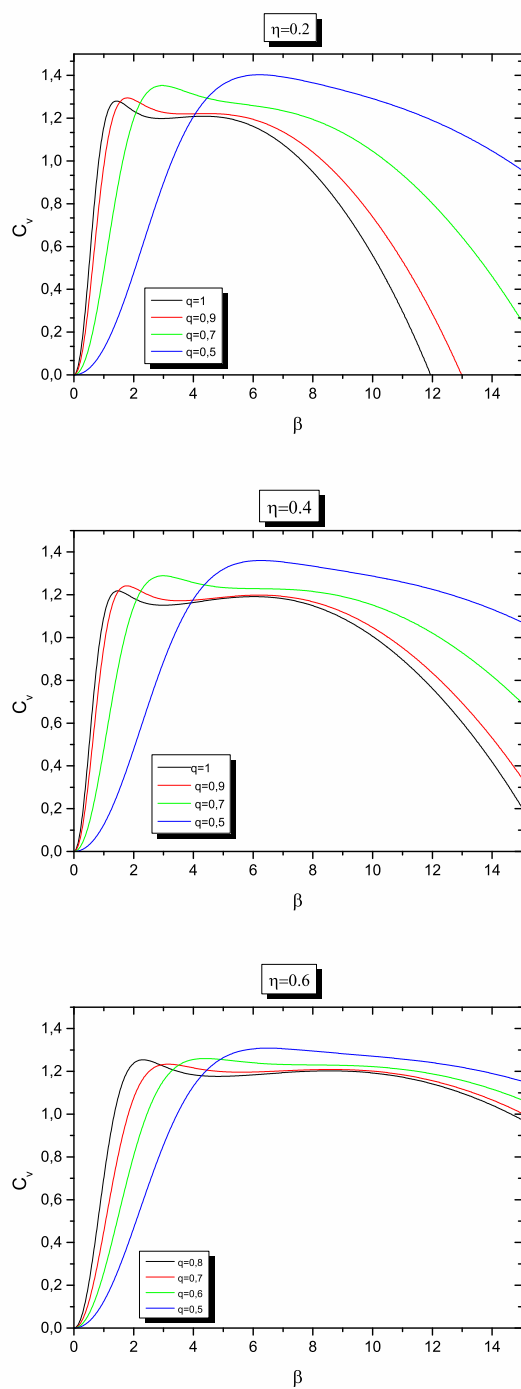


Fig. 3.3 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H_2 selon Zhu et al [2] : fixant η et variant q

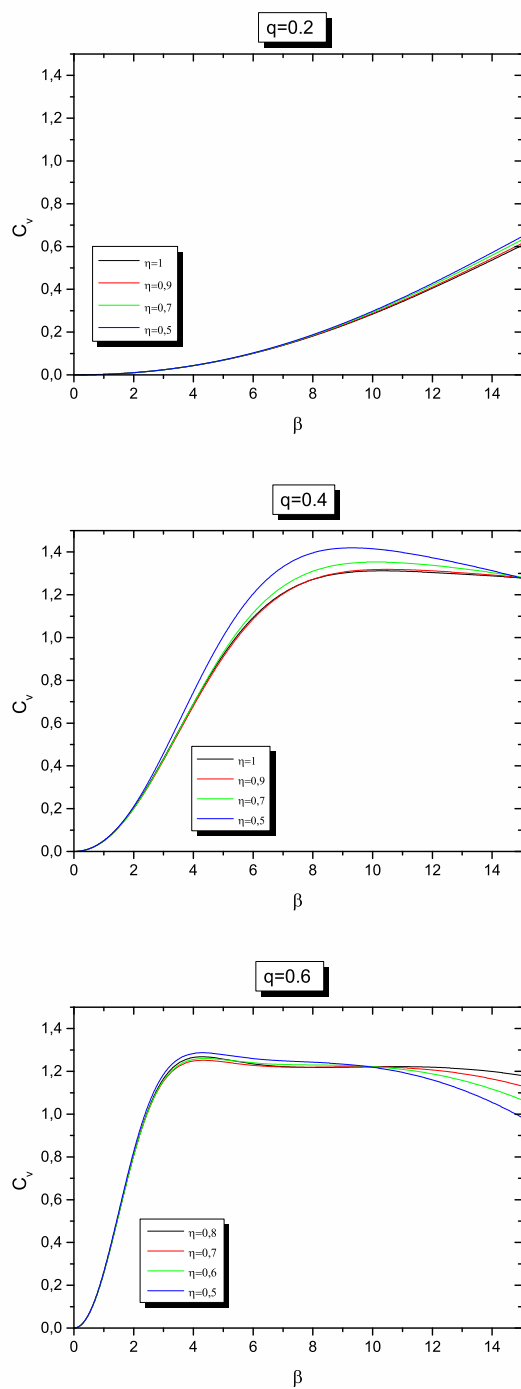


Fig. 3.4 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H_2 selon Zhu et al [2] : fixant q et variant η

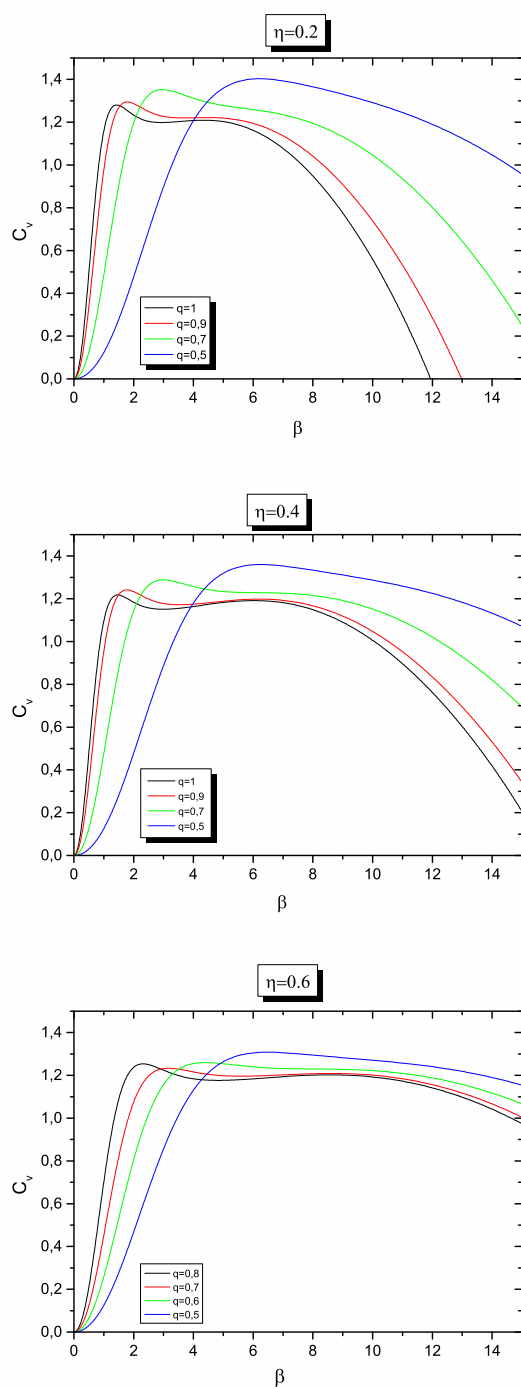


Fig. 3.5 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H_2 selon Gora et al [3] : fixant η et variant q

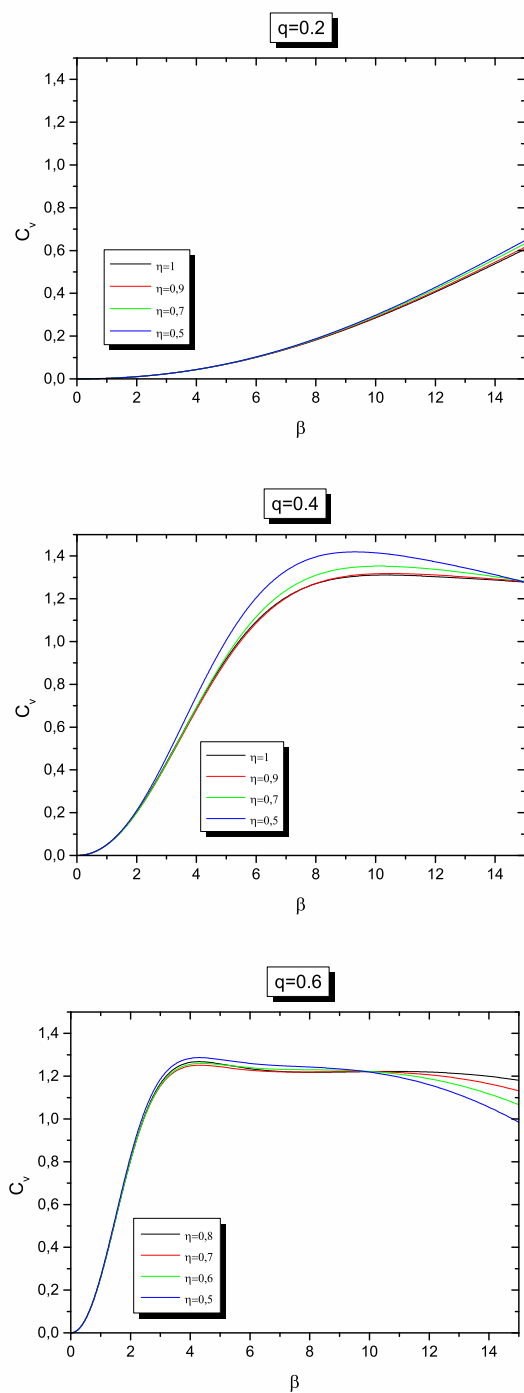


Fig. 3.6 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H_2 selon Gora et al [3] : fixant q et variant η

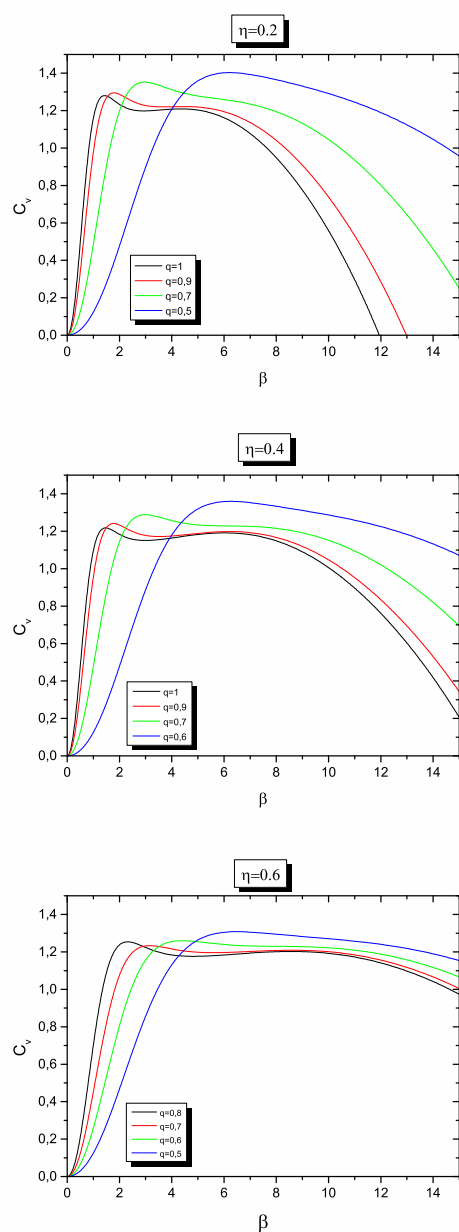


Fig. 3.7 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H_2 selon Li et al [4] : fixant η et variant q

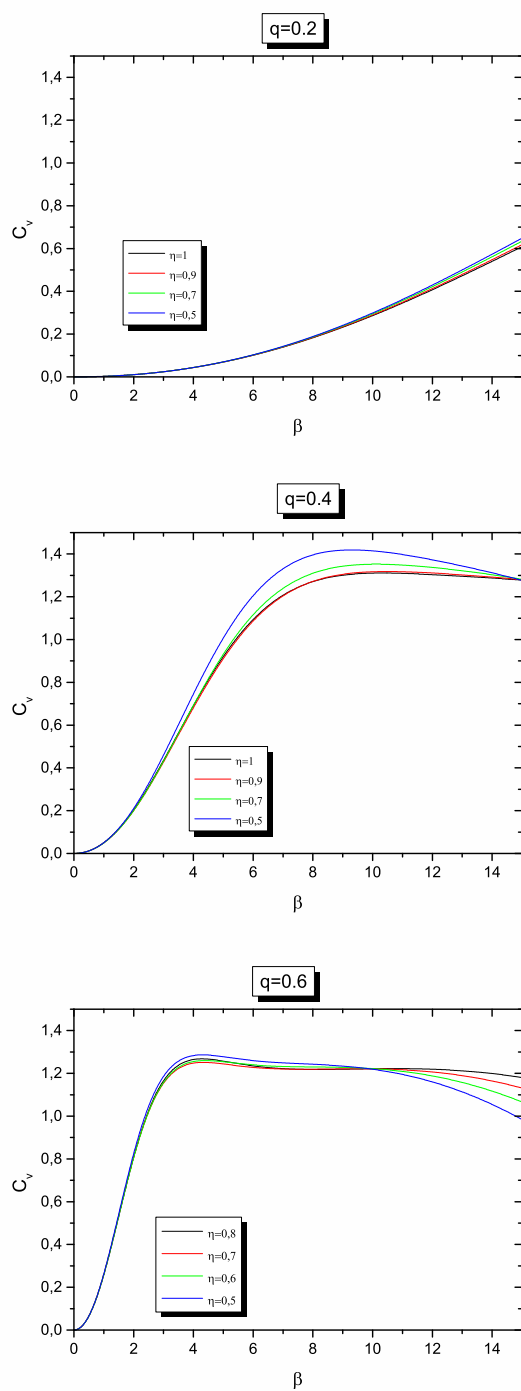


Fig. 3.8 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H_2 selon Li et al [4] : fixant q et variant η

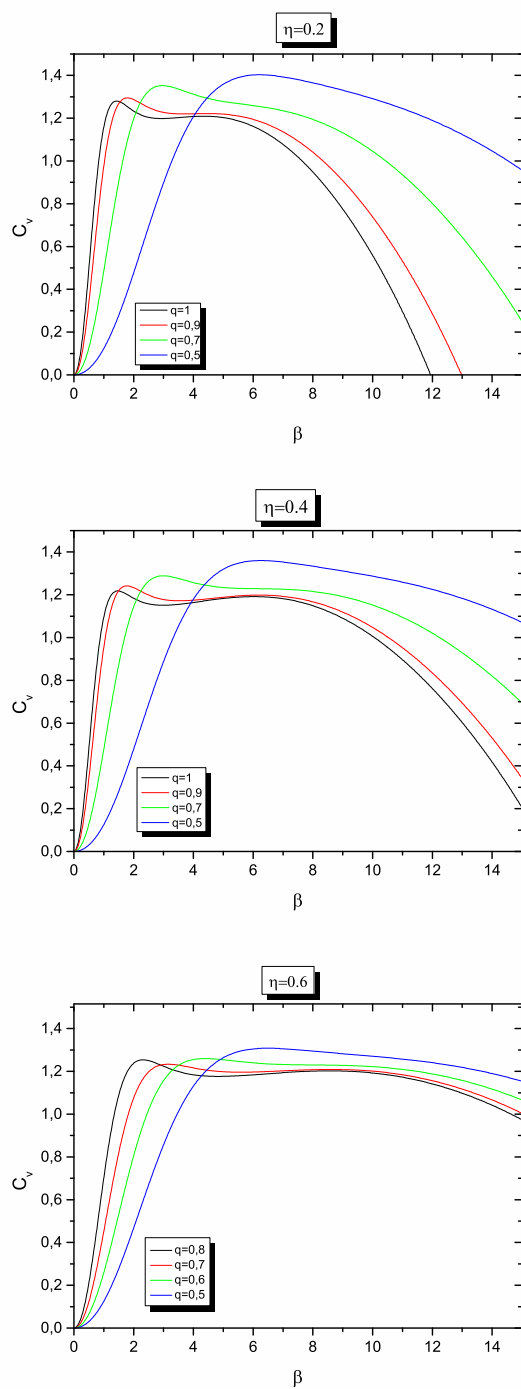


Fig. 3.9 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H_2 selon weyl et al [5] : fixant η et variant q

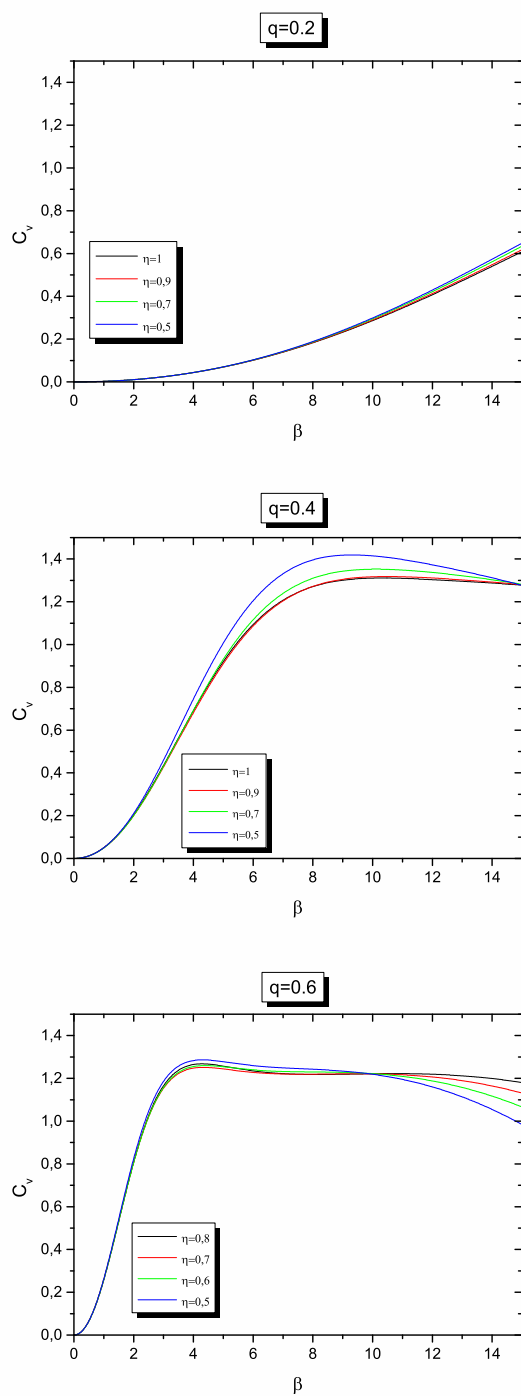


Fig. 3.10 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule H_2 selon weyl et al [5] : fixant q et variant η

3.3 La molécule CO

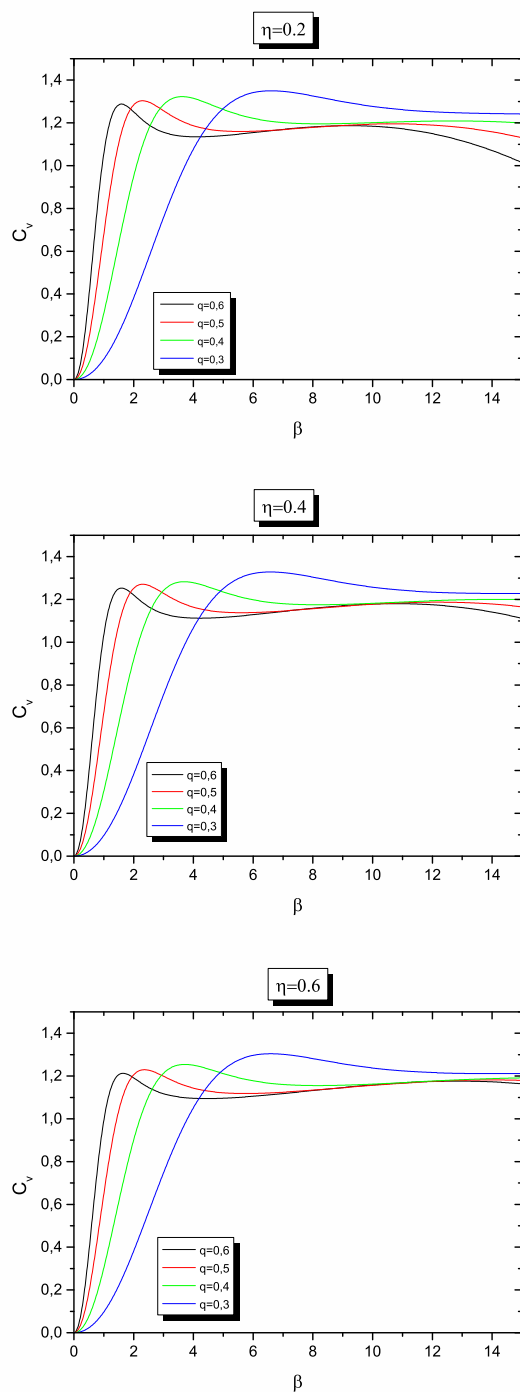


Fig. 3.11 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Roos et al [1] : fixant η et variant q

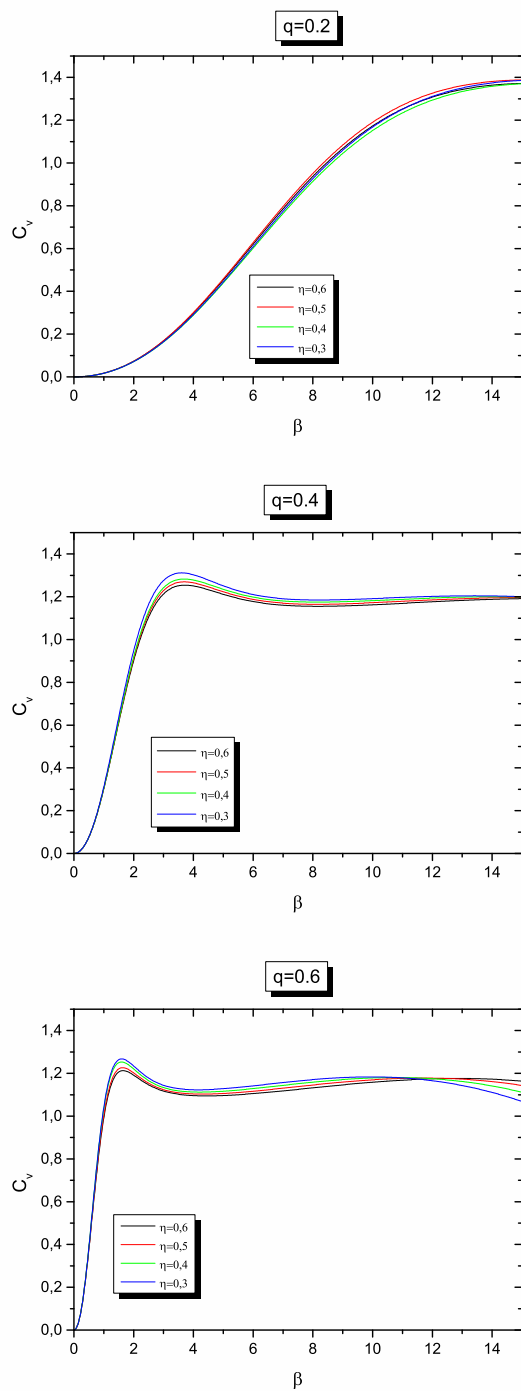


Fig. 3.12 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Roos et al [1] : fixant q et variant η

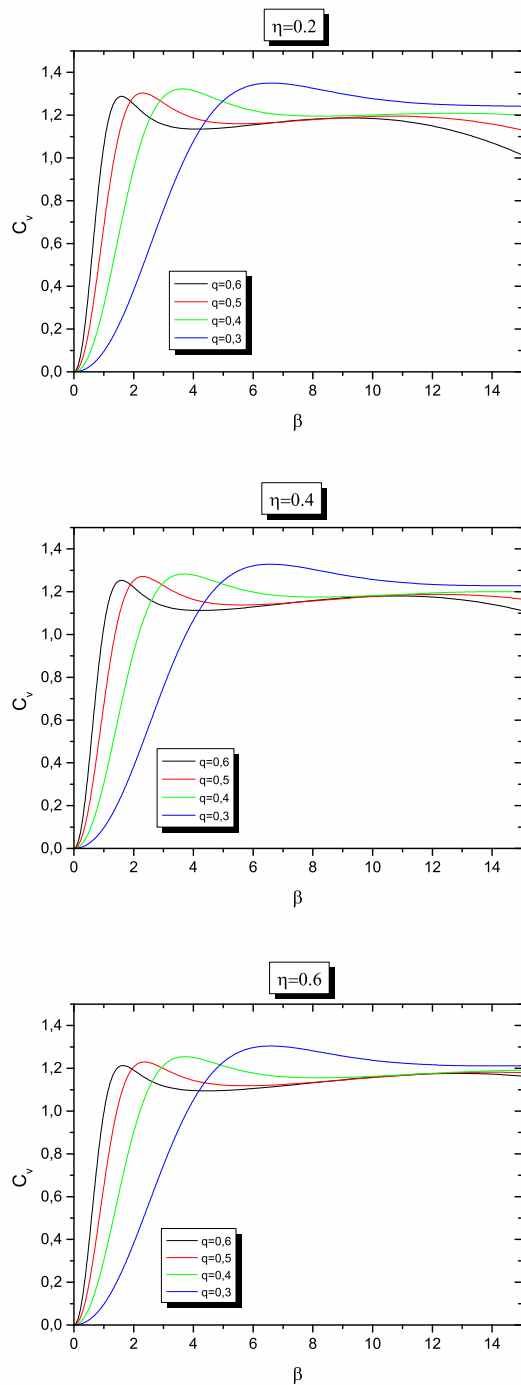


Fig. 3.13 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Zhu et al [2] : fixant η et variant q

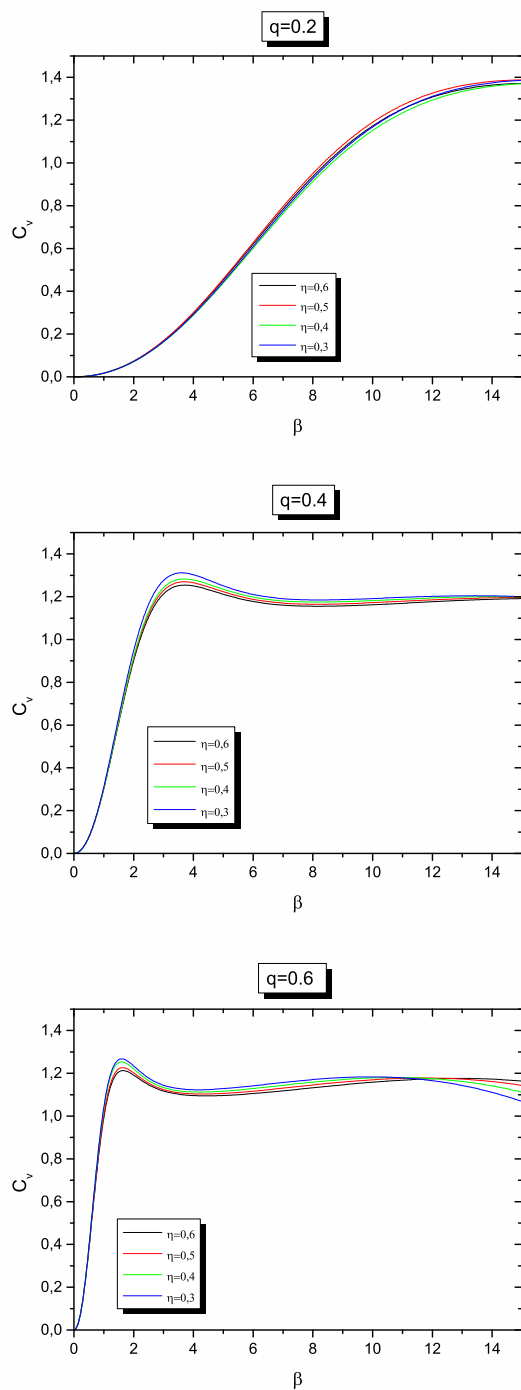


Fig. 3.14 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Zhu et al [2] : fixant q et variant η

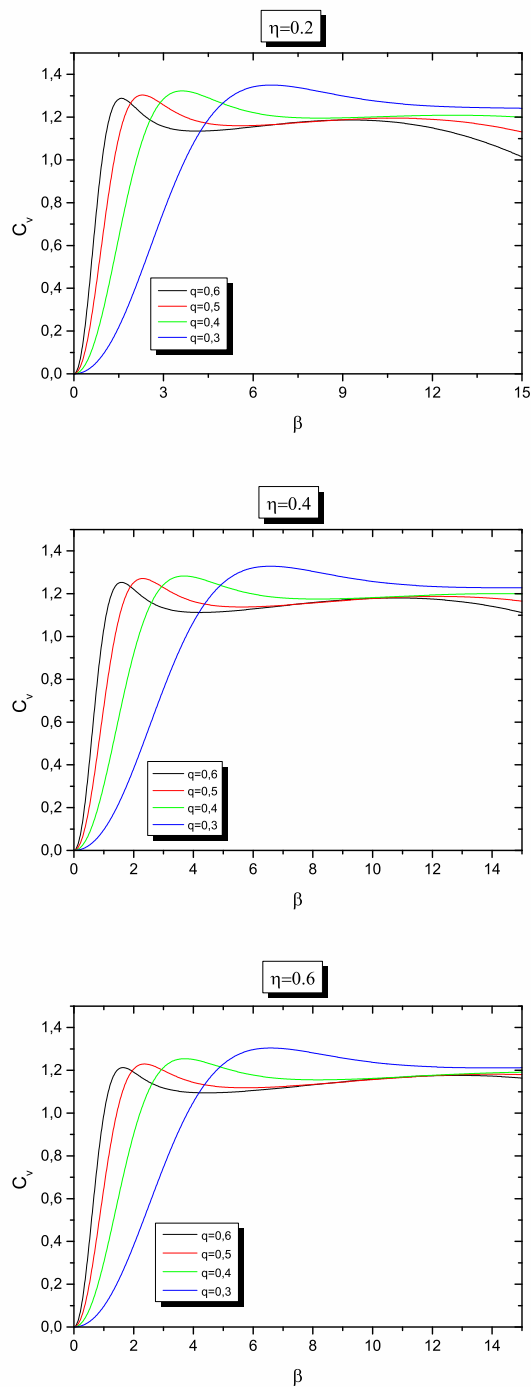


Fig. 3.15 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Gora et al [3] : fixant η et variant q

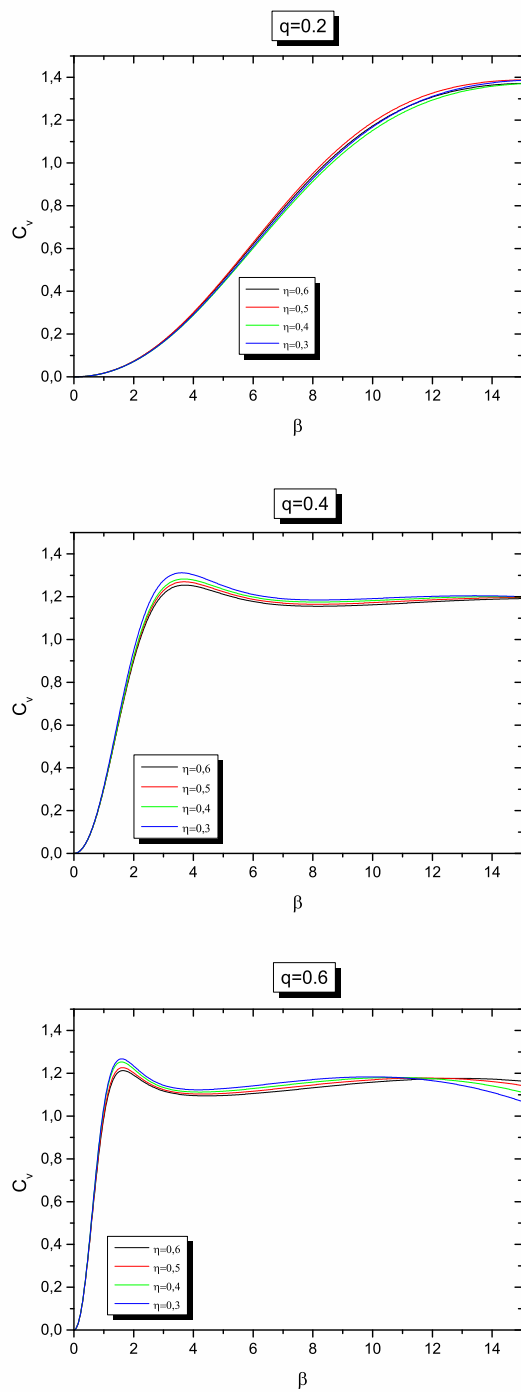


Fig. 3.16 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Gora et al [3] : fixant q et variant η

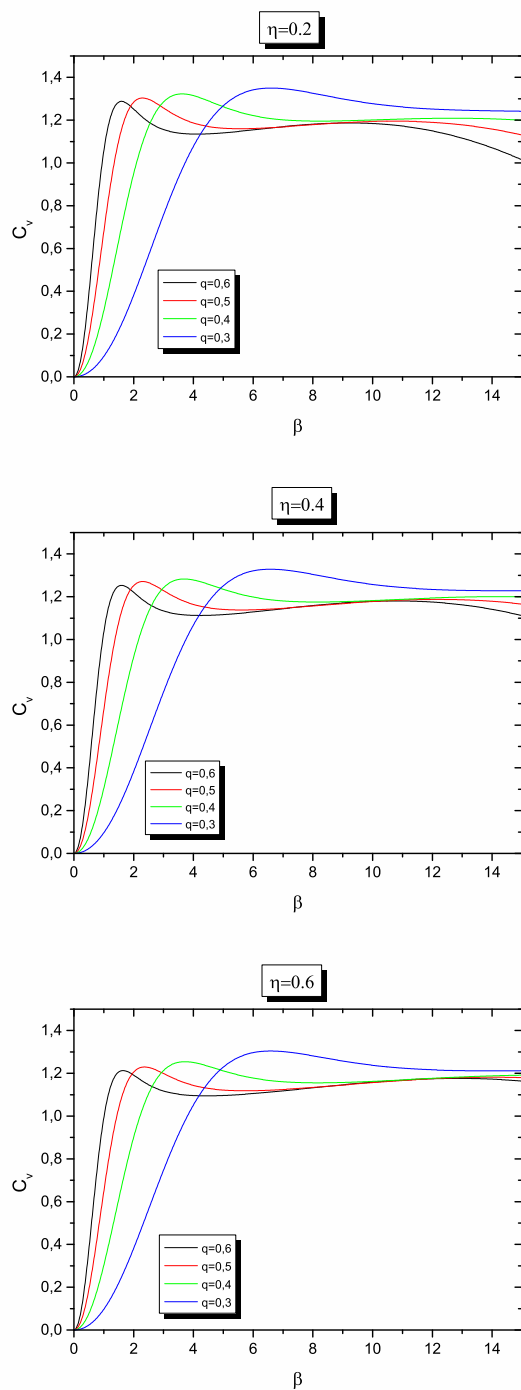


Fig. 3.17 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Li et al [4] : fixant η et variant q

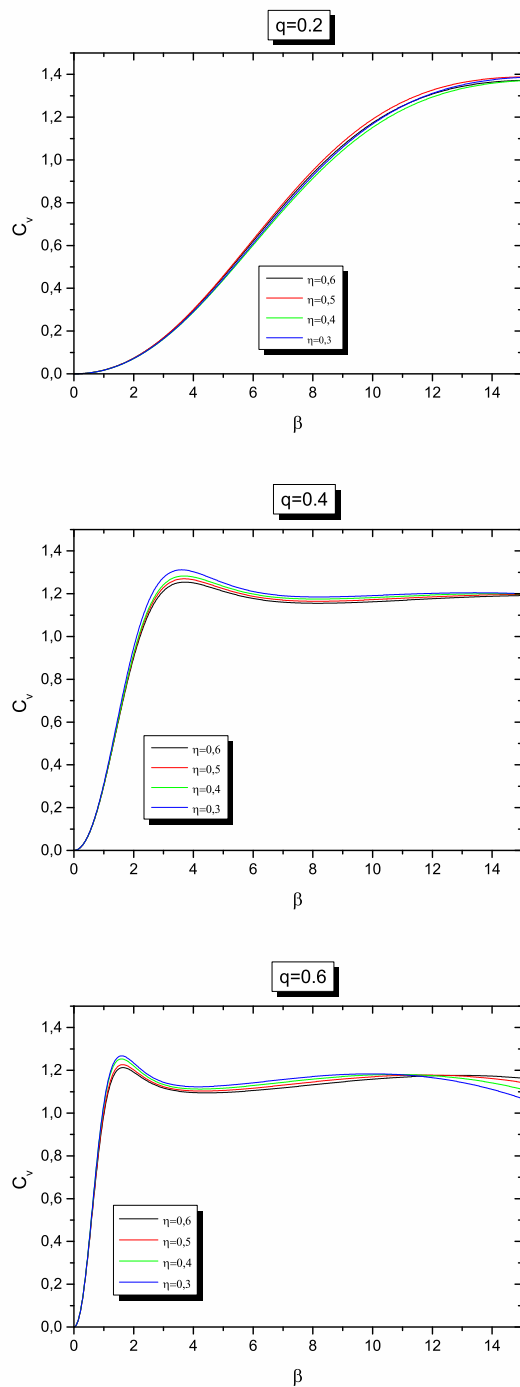


Fig. 3.18 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon Li et al [4] : fixant q et variant η

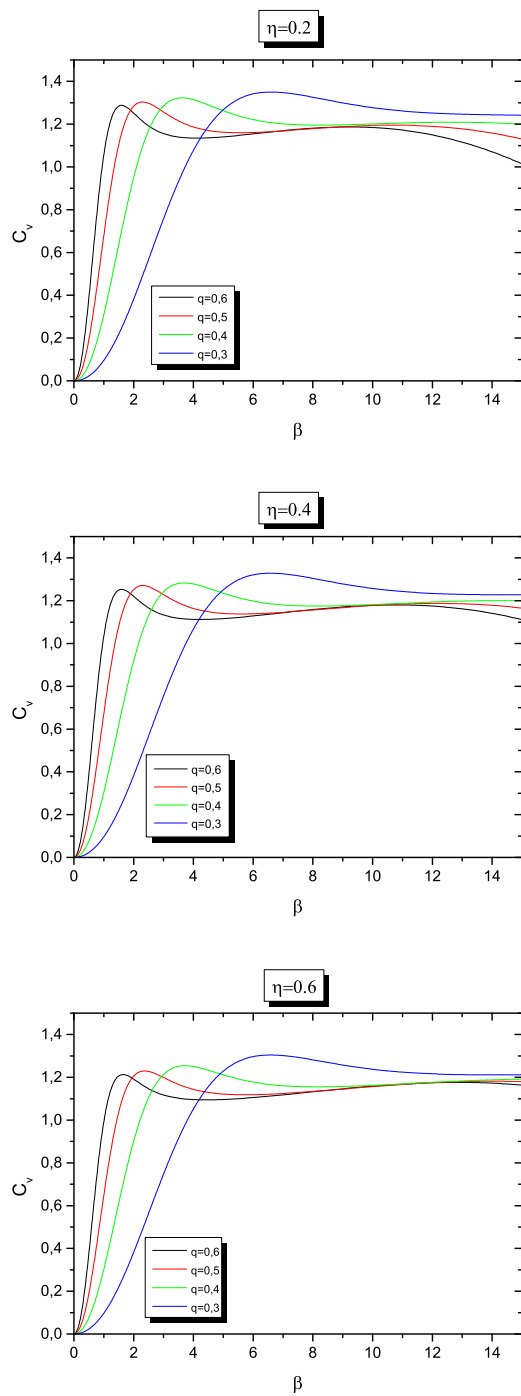


Fig. 3.19 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon weyl et al [5] : fixant η et variant q

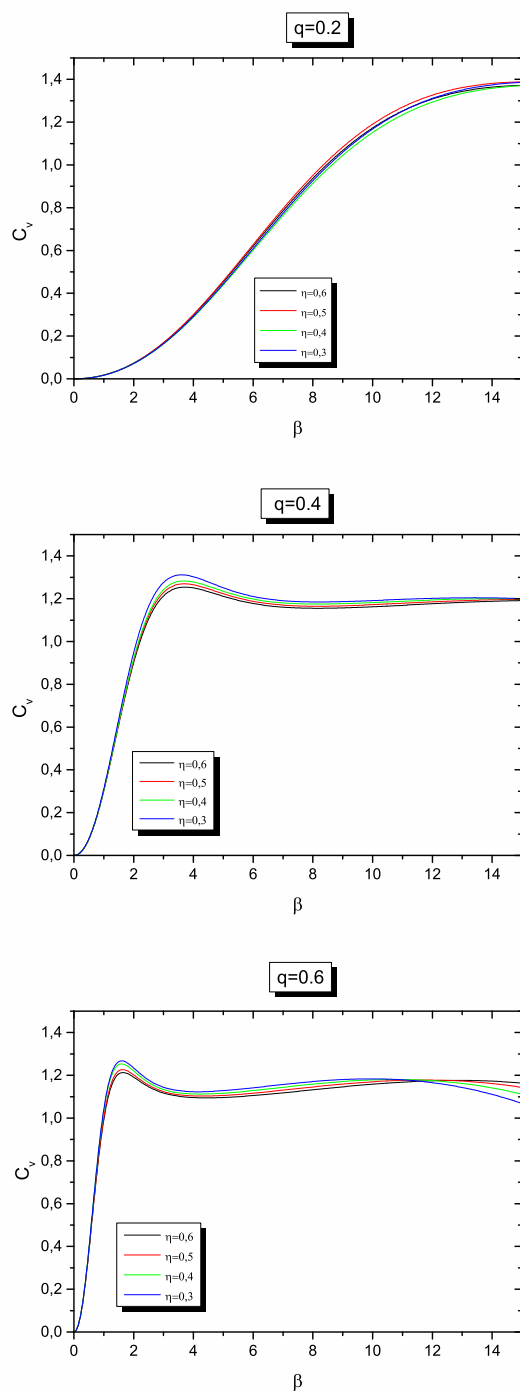


Fig. 3.20 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule CO selon weyl et al [5] : fixant q et variant η

3.4 La molécule HCl

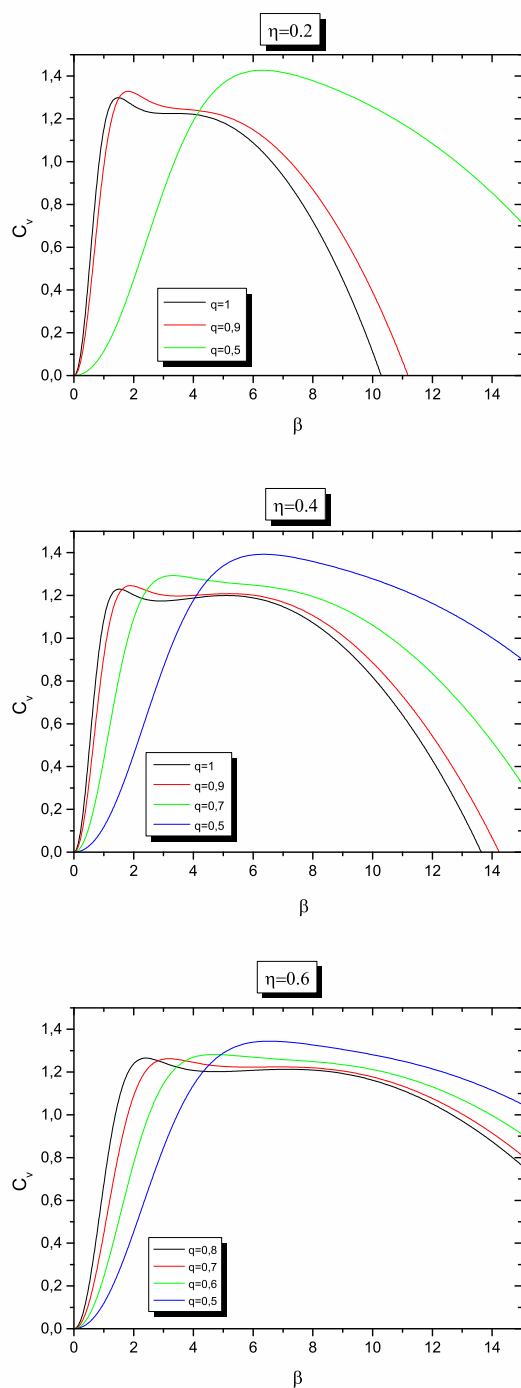


Fig. 3.21 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCl selon Roos et al [1] : fixant η et variant q

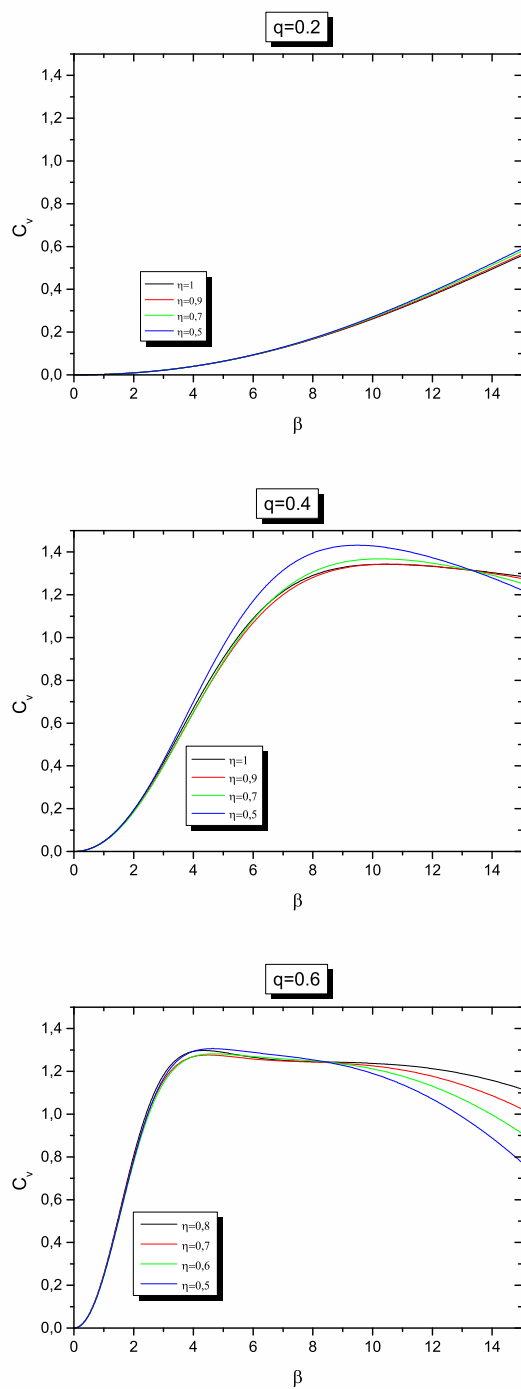


Fig. 3.22 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Roos et al [1] : fixant q et variant η

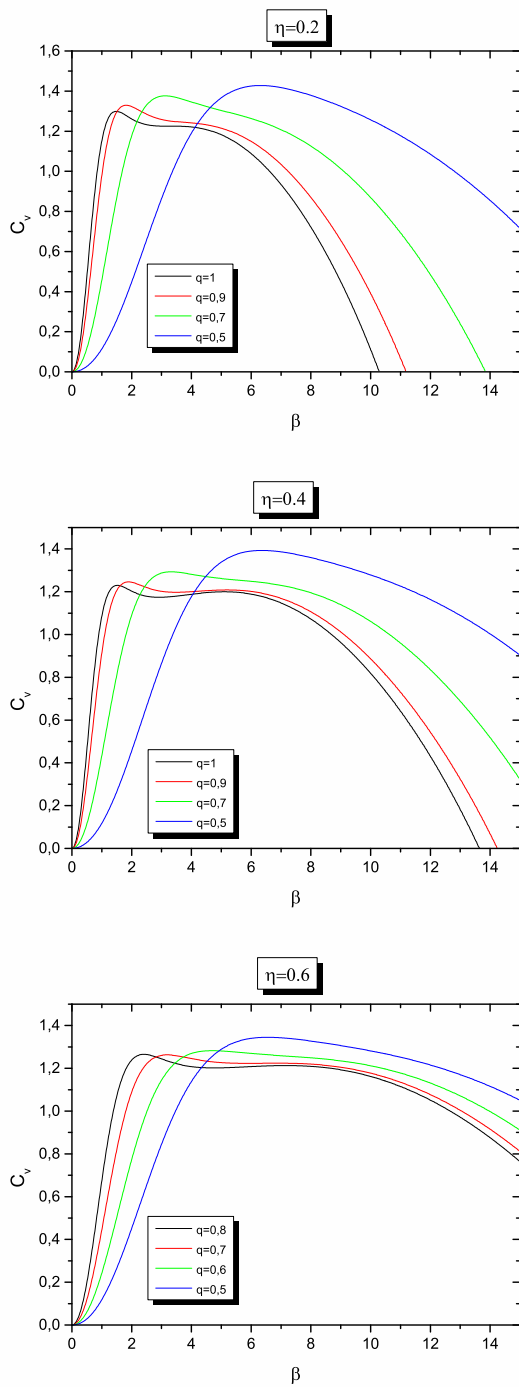


Fig. 3.23 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Zhu et al [2] : fixant η et variant q

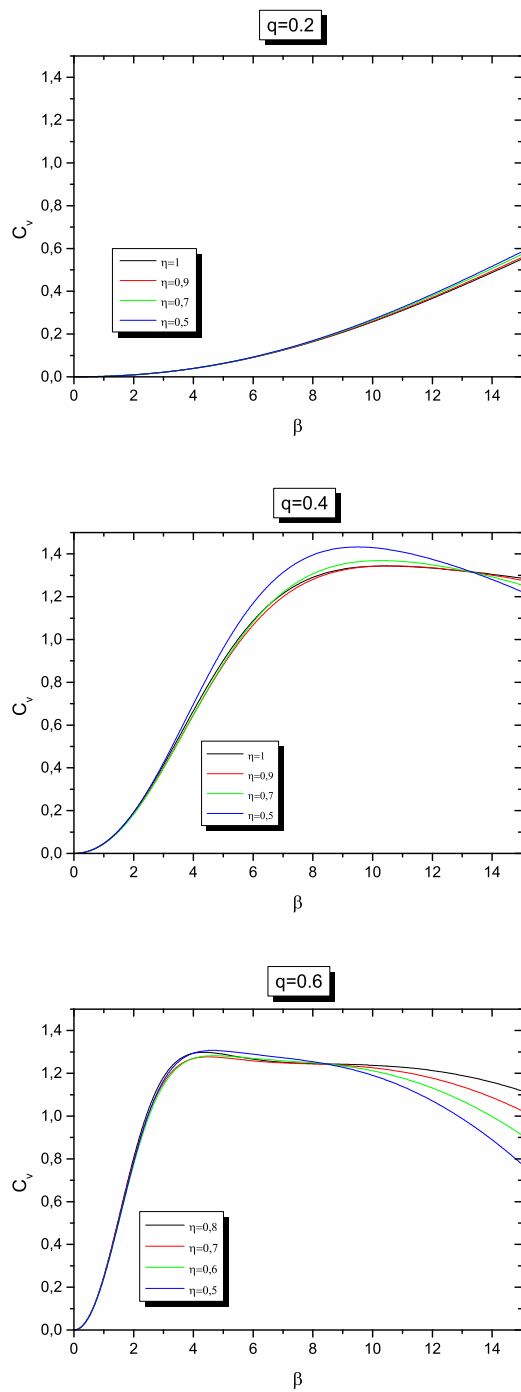


Fig. 3.24 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCl selon Zhu et al [2] : fixant q et variant η

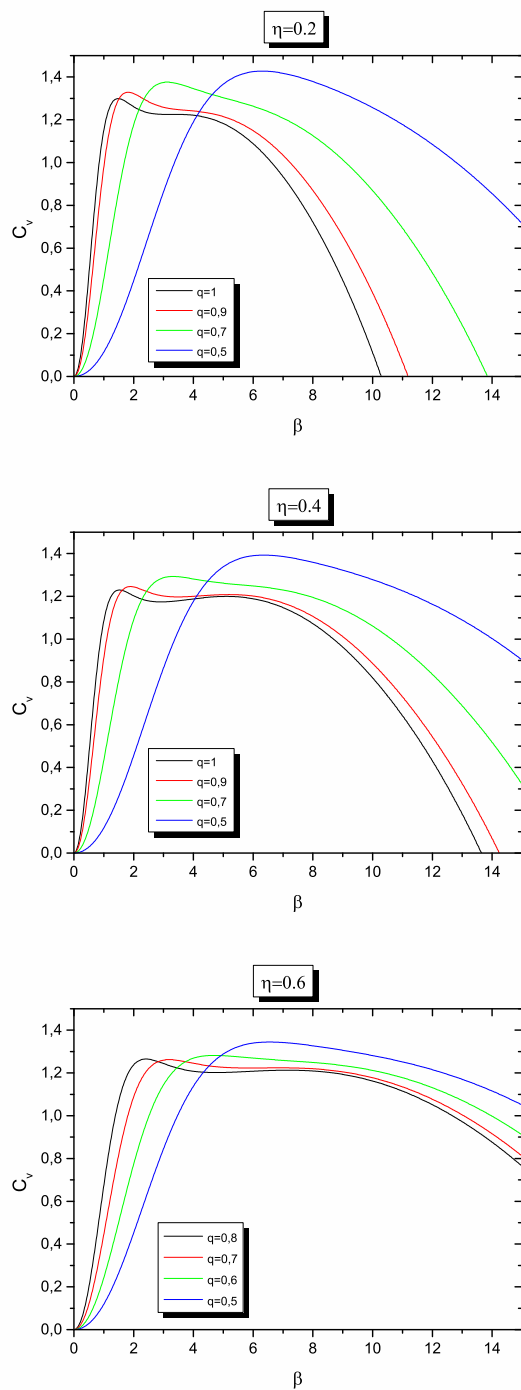


Fig. 3.25 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCl selon Gora et al [3] : fixant η et variant q

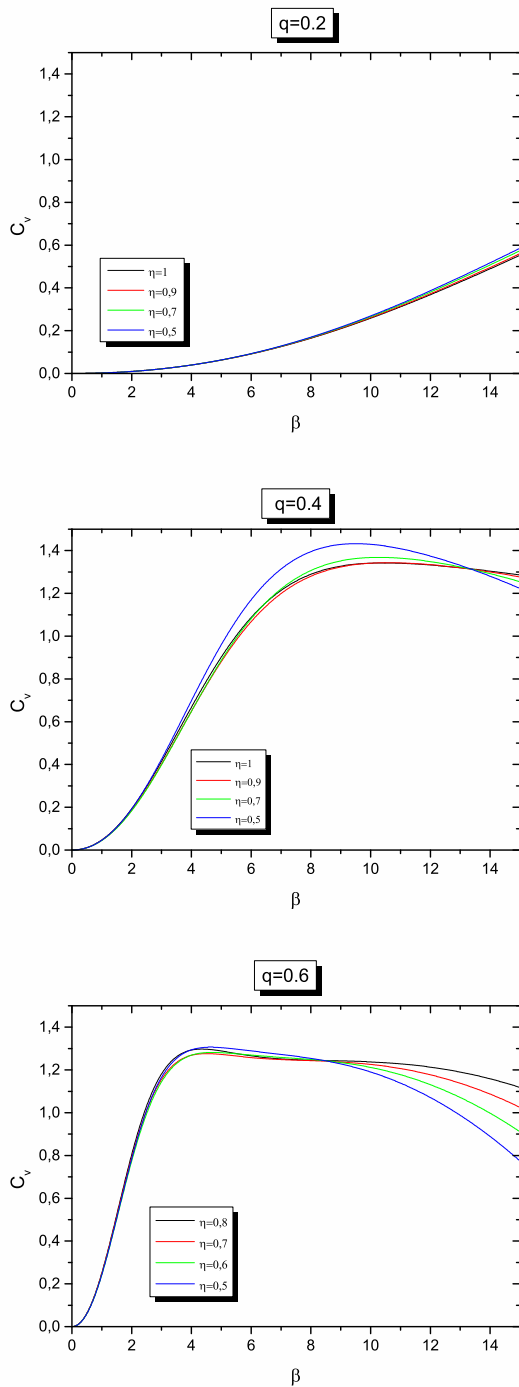


Fig. 3.26 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Gora et al [3] : fixant q et variant η

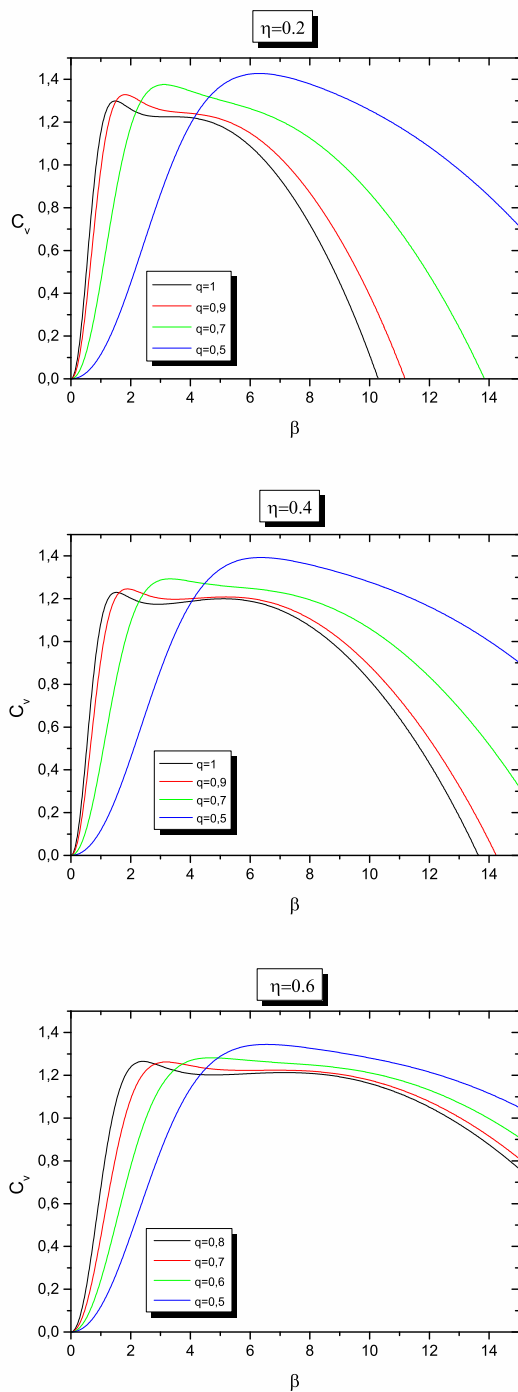


Fig. 3.27 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Li et al [4] : fixant η et variant q

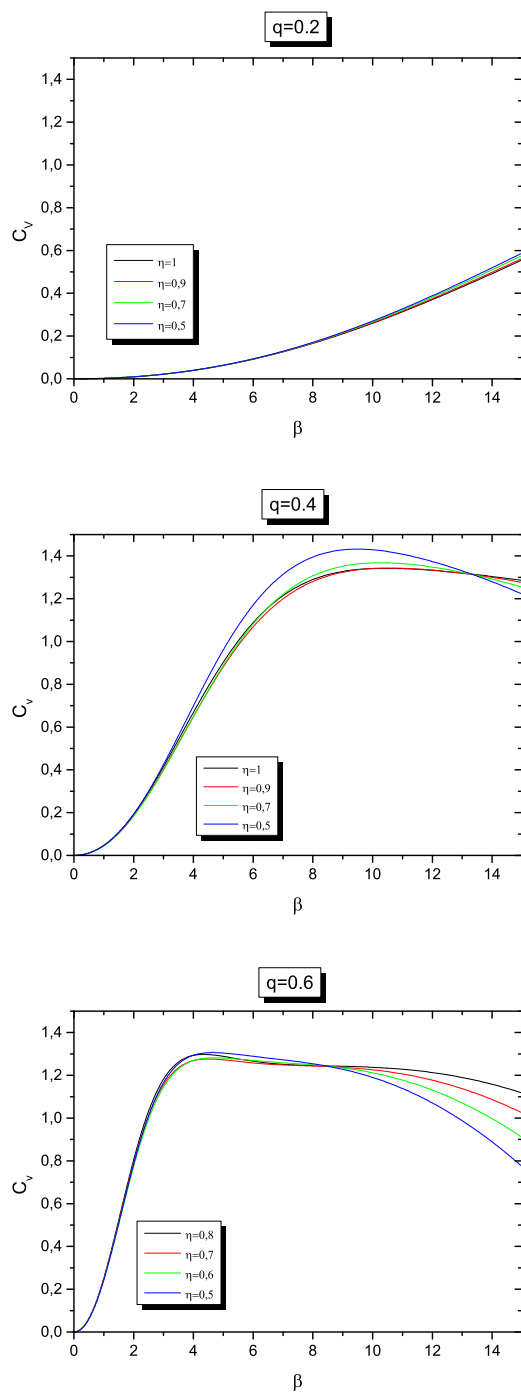


Fig. 3.28 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon Li et al [4] : fixant q et variant η

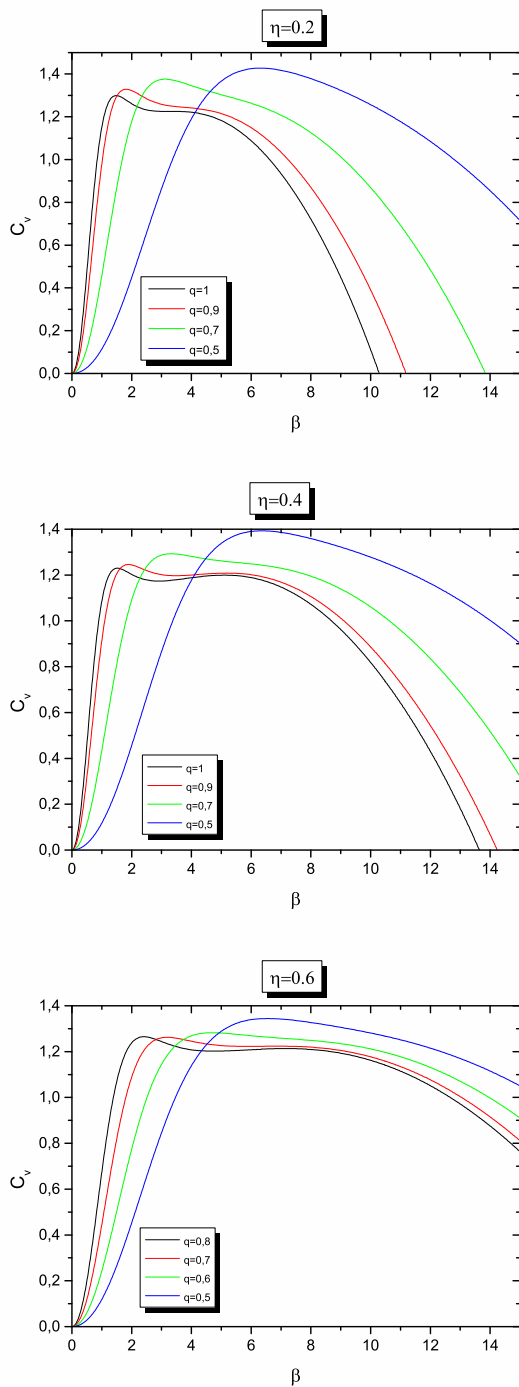


Fig. 3.29 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon weyl et al [5] : fixant η et variant q

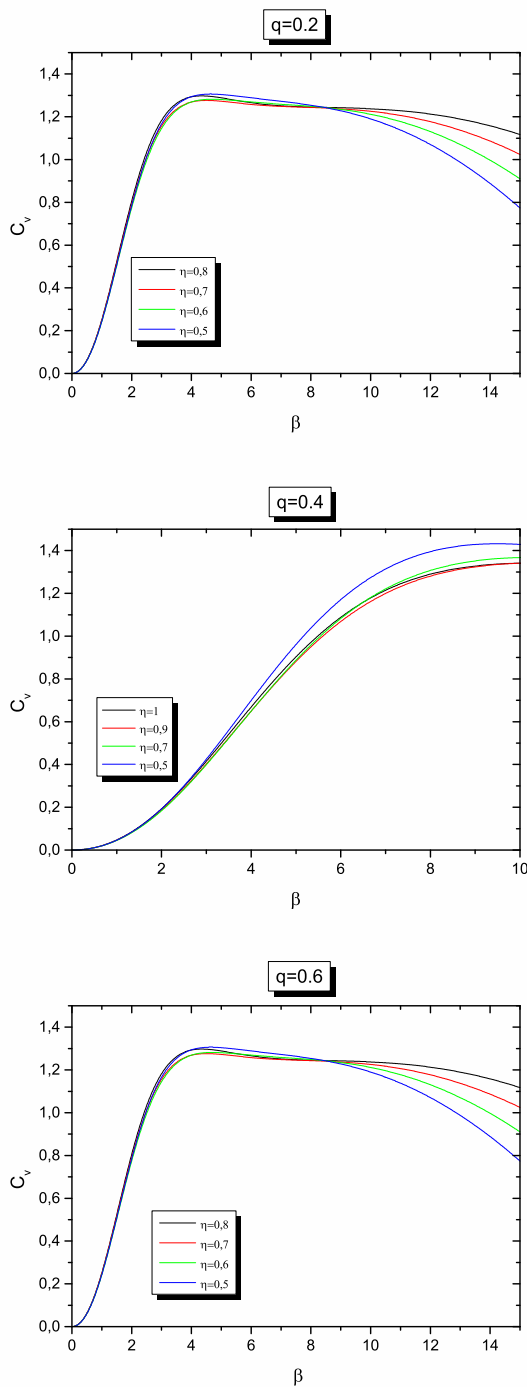


Fig. 3.30 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule HCL selon weyl et al [5] : fixant q et variant η

3.5 La molécule LiH

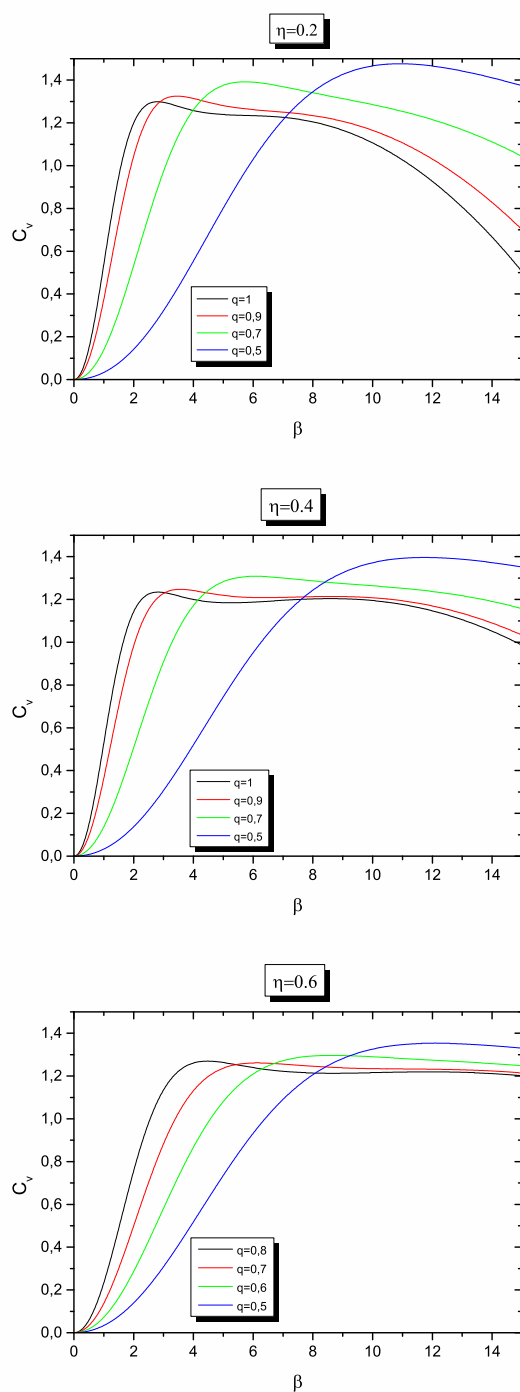


Fig. 3.31 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Roos et al [1] : fixant η et variant q

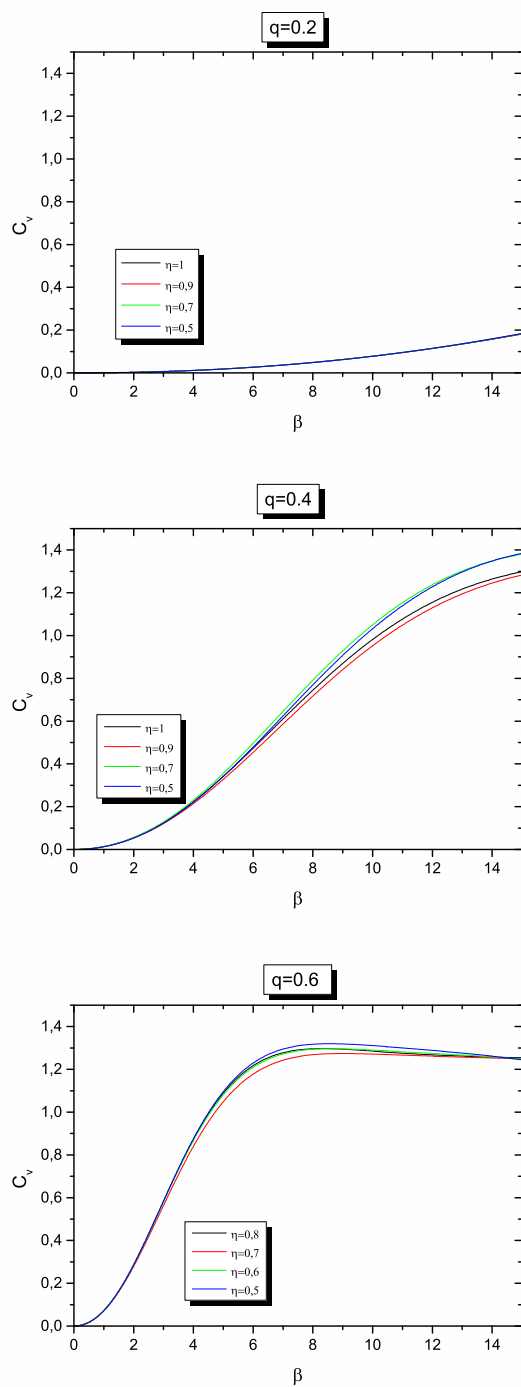


Fig. 3.32 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Roos et al [1] : fixant q et variant η

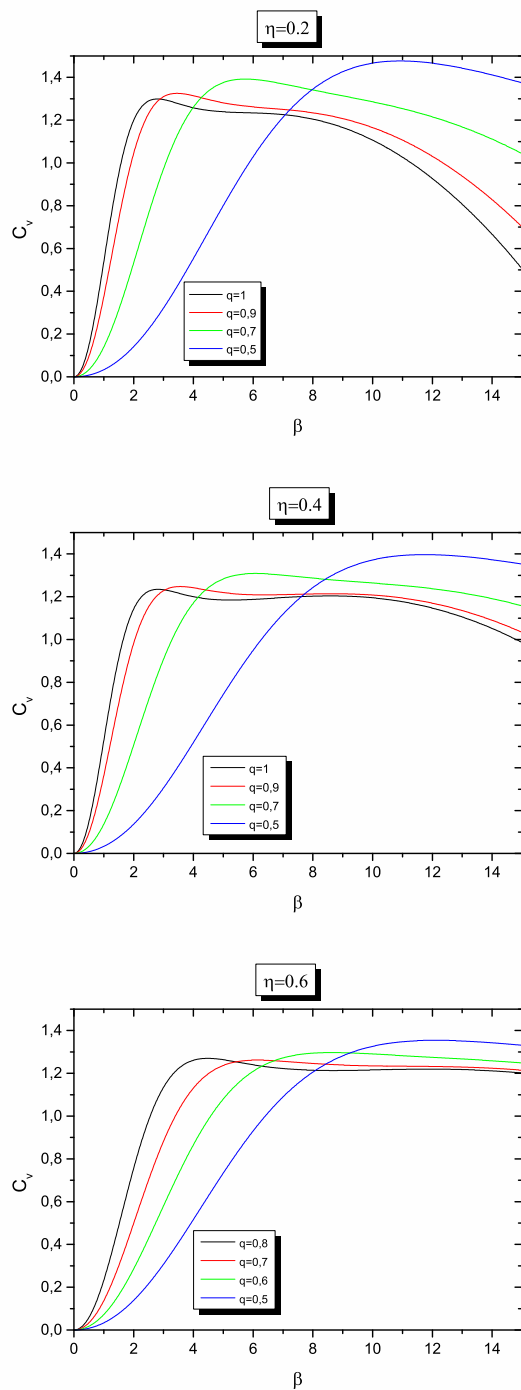


Fig. 3.33 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Zhu et al [2] : fixant η et variant q

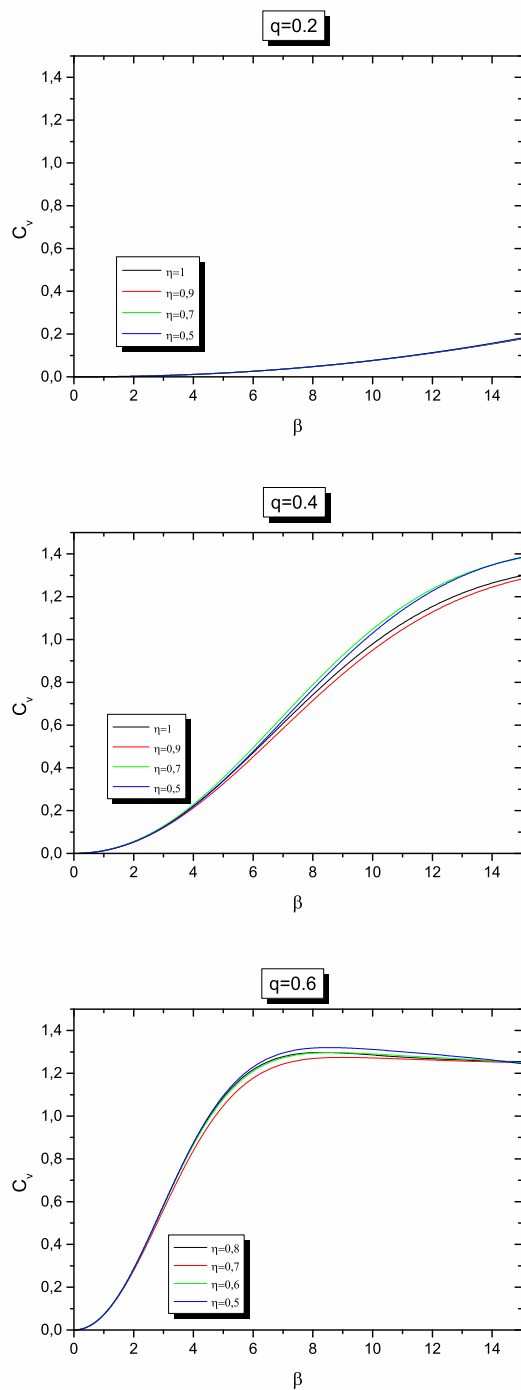


Fig. 3.34 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Zhu et al [2] : fixant q et variant η

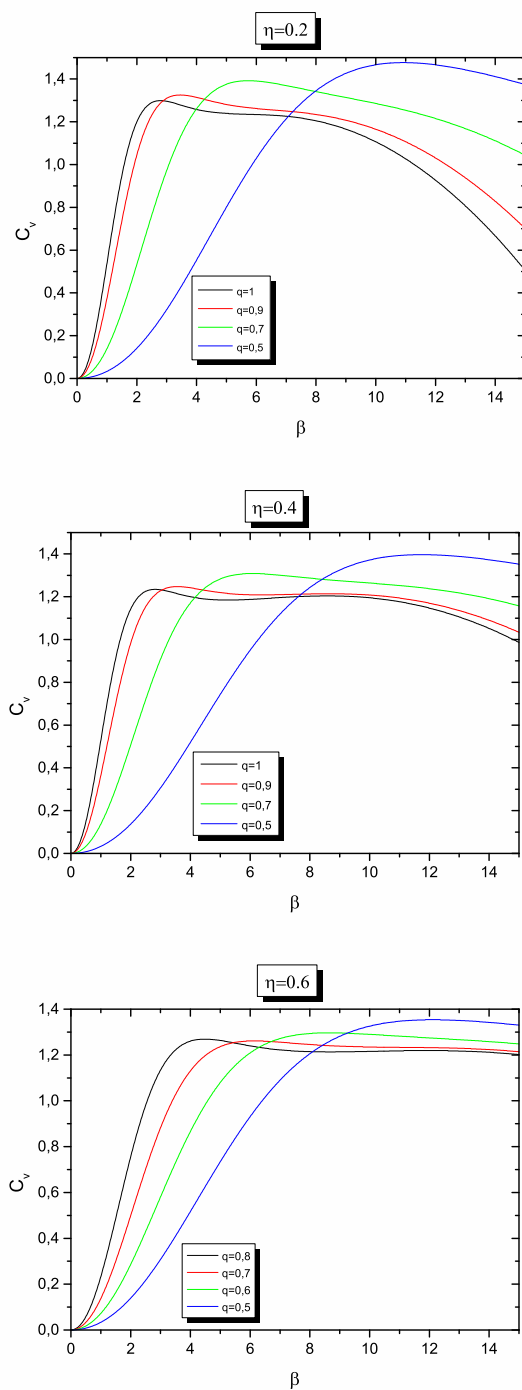


Fig. 3.35 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Gora et al [3] : fixant η et variant q

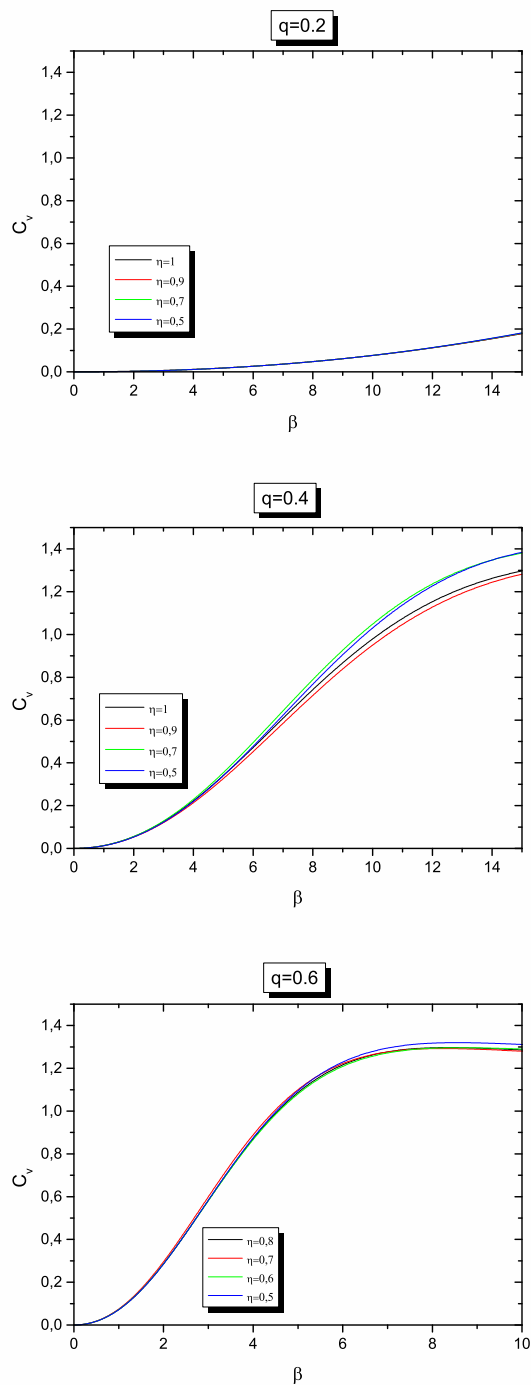


Fig. 3.36 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Gora et al [3] : fixant q et variant η

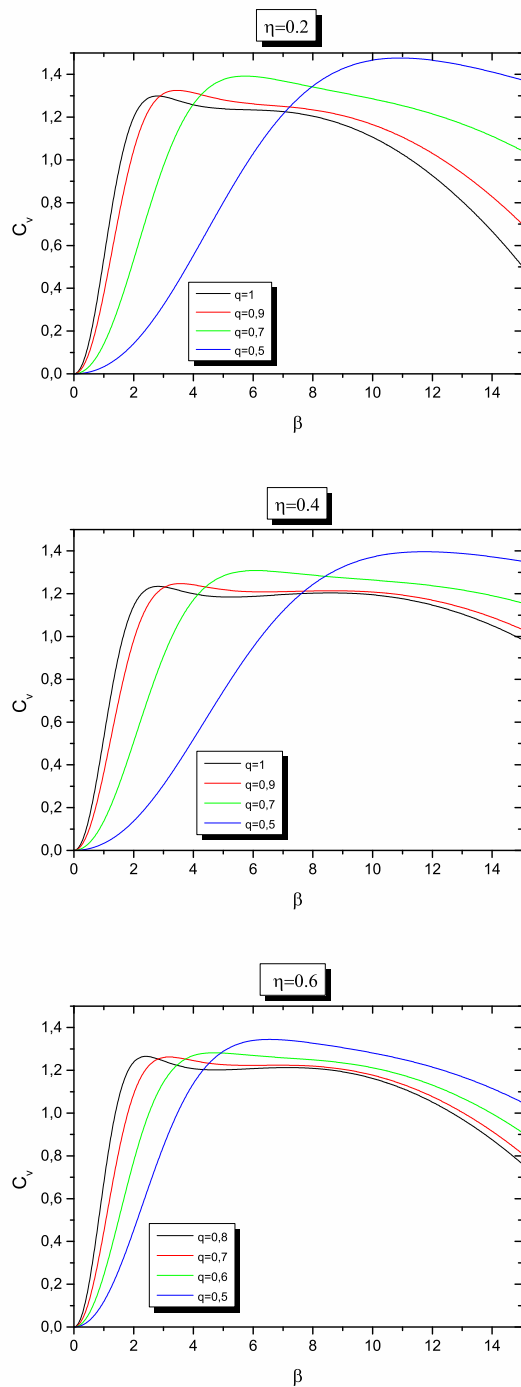


Fig. 3.37 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Li et al [4] : fixant η et variant q

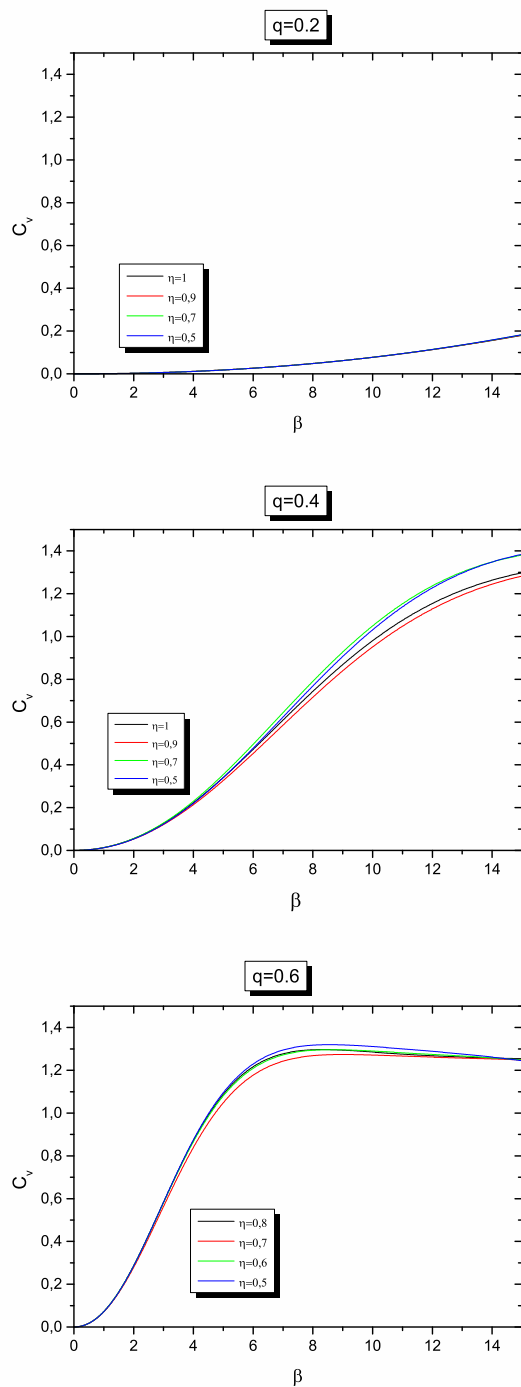


Fig. 3.38 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon Li et al [4] : fixant q et variant η

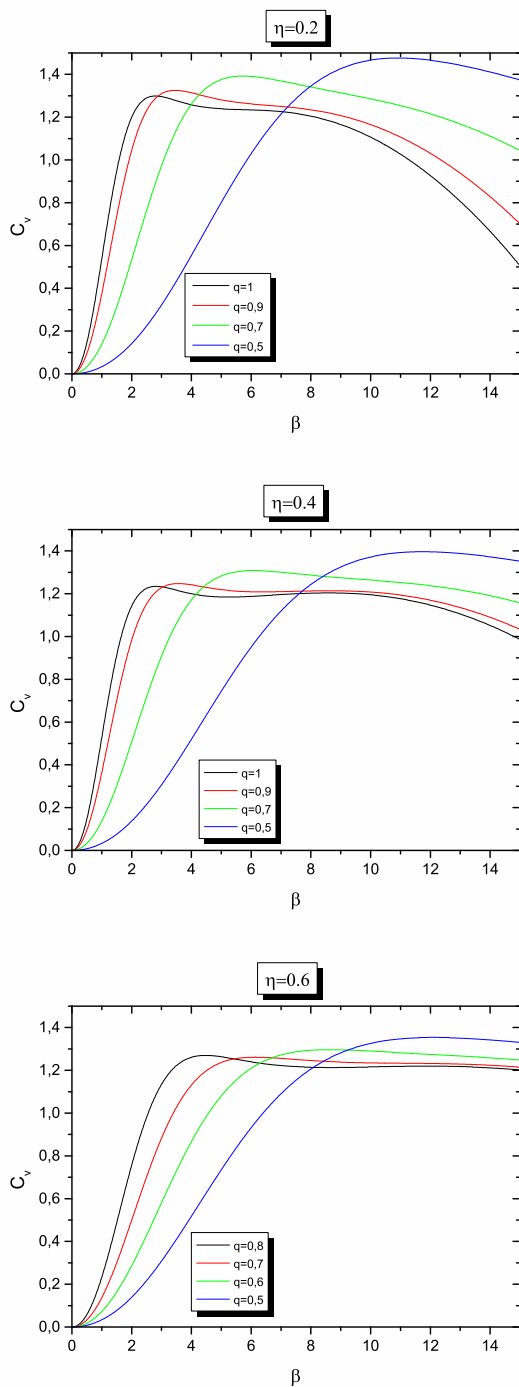


Fig. 3.39 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule *LiH* selon weyl et al [5] : fixant η et variant q

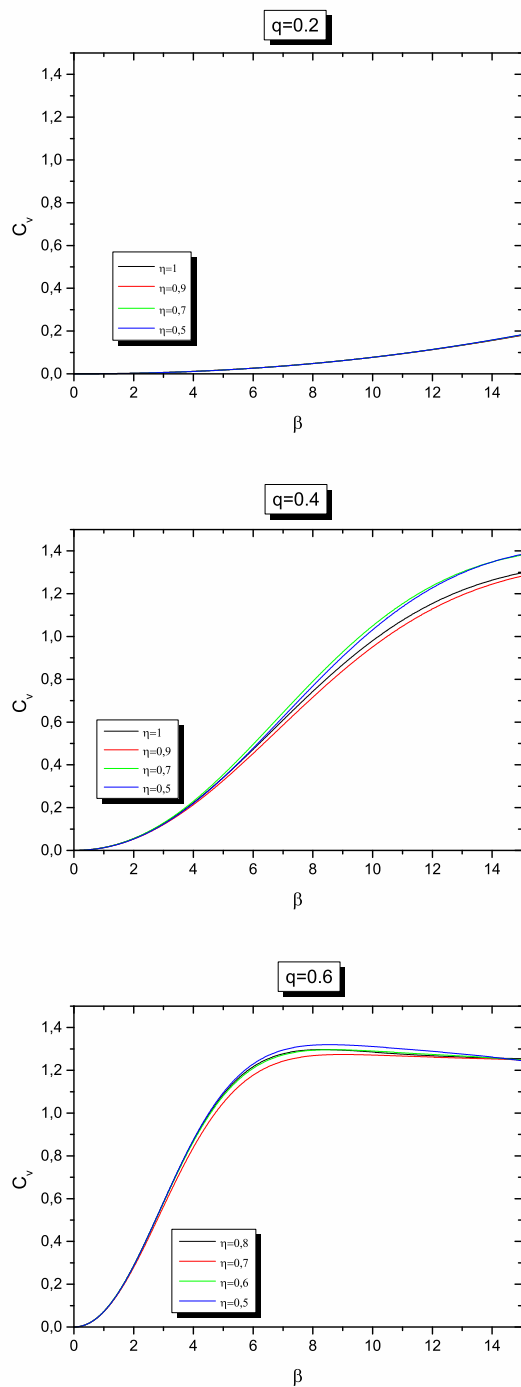


Fig. 3.40 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β de la molécule LiH selon weyl et al [5] : fixant q et variant η

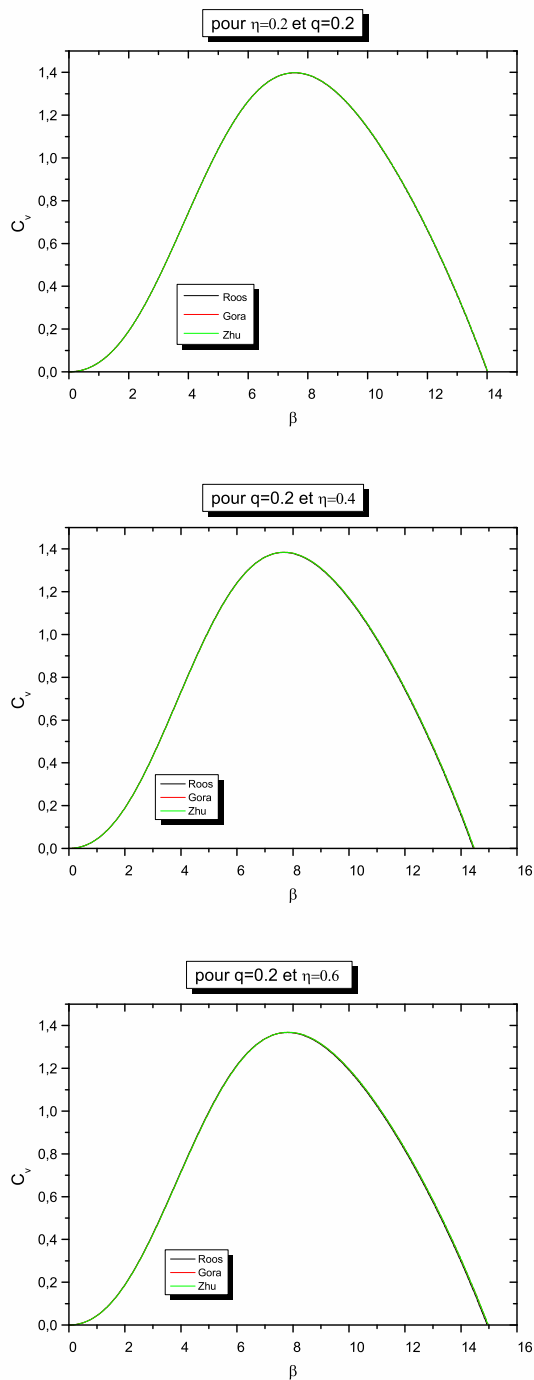


Fig. 3.41 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β pour les quatres molécules H_2 , CO , HCl et LiH

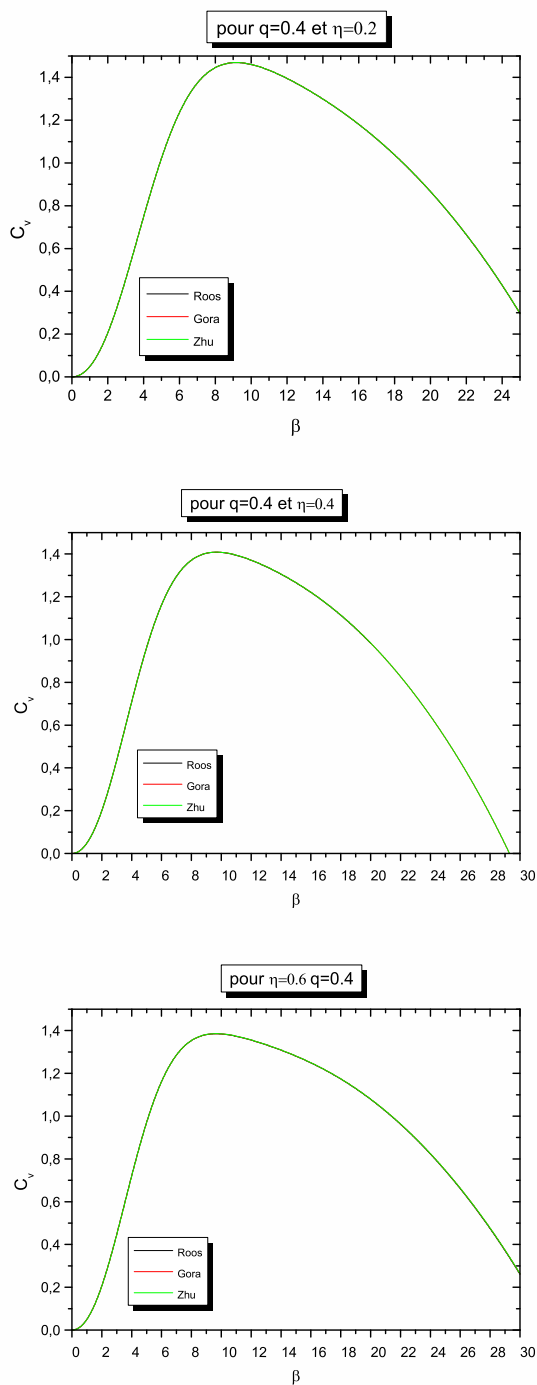


Fig. 3.42 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β pour les quatres molécules H_2 , CO , HCl et LiH

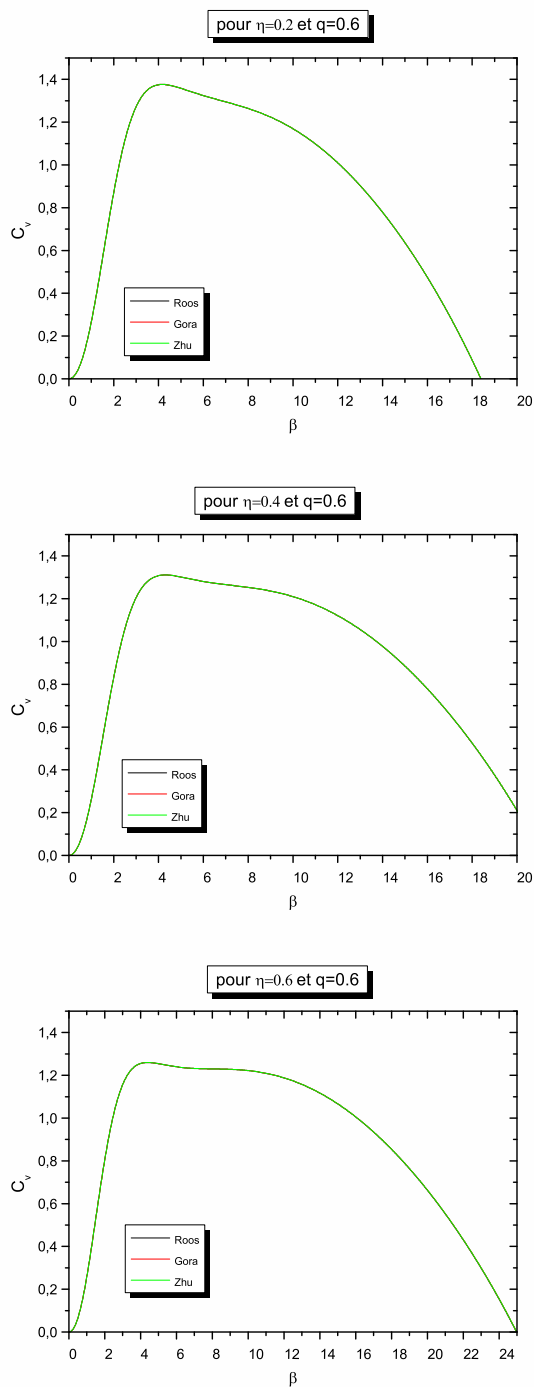


Fig. 3.43 : Chaleur spécifique C_v en fonction de β pour les quatres molécules *H2*, *CO*, *HCl* et *LiH*

Conclusion

Dans ce travail, en utilisant les énergies vibrationnelles obtenues dans le modèle de Morse q -déformé, nous avons effectué un calcul de la fonction de partition vibrationnelle du potentiel de Morse de certaines molécules diatomiques via l'approche Euler – Maclaurin. La fonction de partition obtenue, nous a permis de dériver des expressions explicites pour les fonctions thermodynamiques telles que la chaleur spécifique C_v .

L'utilisation de la méthode NU pour un potentiel de Morse a permis d'avoir les valeurs propres d'énergie et les fonctions propres correspondantes d'une manière analytique. Ces solutions dépendent fortement du paramètre de déformation η . L'étude de la limite donne le cas d'une masse constante. Nous avons calculé les valeurs numériques du nombre quantique n_{max} pour les molécules H_2 , CO , HCl et LiH pour différentes valeurs des nombres de déformation q et η . Ces valeurs ont été utilisées dans la simulation des propriétés thermodynamiques des quatre molécules, H_2 , CO , HCl et LiH . L'exploitation de ces propriétés a permis d'avoir la variation de la chaleur spécifique en fonction de l'inverse de la température pour différentes valeurs des paramètres de déformation q et η .

Tous les résultats obtenus peuvent être récapitulés comme suit

- fixant $\eta \in (0.2, 0.4, 0.6)$ tout en variant $q \in (0.5, 0.7, 0.9, 1)$: on aperçoit que tous les figures de la chaleur spécifique en fonction de l'inverse de température β montrent la même allure et ne coïncident pas. A très basses températures, l'annihilation de la chaleur spécifique, en augmentant les valeurs de q , devient rapide. Ainsi, l'annihilation de notre système dépend inversement du paramètre de déformation q . A basses températures, on trouve directement la troisième loi thermodynamique $\lim_{T \rightarrow 0} C_v = 0$. Aussi, les bosses enregistrées sur les figures de la chaleur spécifique s'étalent lorsque $\eta \rightarrow 1$: elles se déplacent en augmentant les valeurs de q pour η fixe et ça pour les deux choix de $a = 0$ et $a = 1$.
- fixant $q \in (0.2, 0.4, 0.6)$ tout en variant $\eta \in (0.5, 0.7, 0.9, 1)$:
 - l'annihilation, quand $q \rightarrow 1$, est plus rapide,
 - l'absence de déplacement des bosses sur les figures avec l'existence d'une légère différence au voisinage de la bosse,
- L'apparition de la bosse n'indique pas l'existence d'une transition de phase du deuxième ordre selon Landau, mais une ré-orientation de spin.

Bibliography

- [1] O. V. Roos, *Phys. Rev* **1983**, 27, 7547.
- [2] G. Q. Zhu, H. Kroemer, *Phys. Rev* **1983**, 27, 3519.
- [3] T. Gora, F. Williams, *Phys. Rev* **1969**, 177, 1179.
- [4] T. L. Li, K. J. Kuhn, *Phys. Rev. B* **1993**, 47, 12760.
- [5] A. de Souza Dutra, C. A. S. Almeida, *Phys. Lett. A* **2000**, 275, 25–30.
- [6] D. Bonatsost, L. Britot, D. Menezes, *J. Phys. A: Math. Gen* **1993**, 26, 895.
- [7] P. P. Kulish, E. V. Damaskinsky, *J. Phys. A: Math. Gen* **1990**, 23, 415.
- [8] Y. Ng, *J. Phys. A: Math. Gen* **1990**, 23, 1023.
- [9] L. C. Biedenharn, *J. Phys. A: Math. Gen* **1989**, 22, 873.
- [10] A. J. Macfarlane, *J. Phys. A: Math. Gen* **1989**, 22, 4581.
- [11] A. Lorek, A. Ruffing, J. Wess, *Phys. C* **1997**, 74, 369.
- [12] I. L. Cooper, R. K. Gupta, *Phys. Rev. A* **1995**, 52, 941.
- [13] A. Lavagno, A. M. Scarfone, P. N. Swamy, *Eur. Phys. J C* **2006**, 47, 253.
- [14] J. C. rnugejl, M. Martinis, V. Mikuta-Martinis, *Phys. Lett. A* **1994**, 188, 347.
- [15] A. M. Gavrilik, I. I. Kachurik, A. V. Lukash, *Ukr. J. Phys* **2013**, 58, 1025.
- [16] M. S. Abdalla, H. Eleuch, *J. Appl. Phys* **2014**, 115, 234906.
- [17] S. Cai, G. Su, J. Chen, *J. Phys. A: Math. Theor* **2007**, 40, 11245.
- [18] W. S. Chung, *Int. J. Mod. Phys B* **2015**, 29, 1550177.
- [19] M. Angelova, A. Frank, *Phys. At. Nucl* **2005**, 68, 1625.
- [20] M. Angelova, A. Franck, *Phys. At. Nucl* **2005**, 68, 1689.
- [21] A. Algin, M. Senay, *Phys. A* **2016**, 447, 232.
- [22] P. M. Morse, *Phys. Rev* **1929**, 34, 57.

- [23] M. L. Strekalov, *Chem. Phys* **2007**, *439*, 209–212.
- [24] C.-S. Jia, L.-H. Zhang, C.-W. Wang, *Chem. Phys. Lett* **2017**, *667*, 211.
- [25] C.-S. Jia, C.-W. Wang, L.-H. Zhang, X.-L. Peng, R. Zenga, X.-T. You, *Chem. Phys. Lett* **2017**, *676*, 150.
- [26] L. Serra, E. Lipparini, *Europhys. Lett* **1997**, *40*, 667.
- [27] J. Thomesen, P. C. Hemmer, *Phys. Rev. B* **1989**, *39*, 12387.
- [28] A. E. K. Al-Aakol, Master's thesis, Eastern Mediterranean University, **2013**.
- [29] J. M. Lèvy-Leblond, *Phys. Rev* **1995**, *52*, 1845.
- [30] D. L. Smith, C. Mailhot, *Rev. Mod. Phys* **1990**, *62*, 174.
- [31] R. A. Morrow, K. R. Brownstein, *Phys. Rev. A* **1984**, *30*, 687.
- [32] M. R. Pahlavani, *Open InTech* **2012**, *51*, 598.
- [33] A. Arda, R. Sever, *Commun. Theor. Phys* **2011**, *56*, 51–54.
- [34] O. Cherroudz, S. A. Yahiaoui, M. Bentaiba, *arXiv:167.03820v2 (last version 05 Nov)* **2016**.
- [35] H. Hassanabadi, S. Zare, *Eur. Phys. J. Plus* **2017**, *132*, 49.
- [36] G. Ovando, J. J. Pena, J. Morales, J. LopezBonilla, *Phys. Conf* **2017**, *792*, 012037.
- [37] D. Moussadek, mathesis, Univ. Mentouri- Constantine, **2012**.
- [38] A. Bounab, Master's thesis, Université Mohamed Boudiaf - M'sila, **2016**.
- [39] S. M. Ikhdaïr, *Mol. Phys* **2012**, *110*, 1415.
- [40] k. Sahra, S. Abdelhai, Master's thesis, Univ. Larbi-Tébessi.Tébessa, **2017**.
- [41] A. Boumali, *J. Math. Chem* **2018**, *56*, 1656–1666.
- [42] L.D.Landau, E.M.Lifshitz, *Statistical*, Vol. 5 of *Course of Theoretical Physics*, P. Press (Ed.), Pergamon Press, **1969**.