



FACULTE DES SCIENCES EXACTES ET INFORMATIQUE
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre :
Série :

MEMOIRE
présenté pour obtenir le diplôme de master
Filière : physique
Spécialité : Physique Théorique

Présenté par

Sifour Mouna

Intitulé

**Etats liés des potentiels de Morse et de Pöschl-Teller
en présence des interactions ponctuelles**

Soutenu le : 03/07/2018

Devant le jury:

Président :	S.Haouat	Prof.	Univ. MSBY, Jijel
Rapporteur :	N.Ferkous	MCA.	Univ. MSBY, Jijel
Examineur :	B.Guettou	MAA	Univ. MSBY, Jijel



Remerciements

Mes remerciements vont premièrement à Dieu tout puissant pour la volonté, la santé et la patience, qu'il m'a donnée durant toutes ces années d'étude.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et mes vifs remerciements à mon encadreur Monsieur N. Ferkous qui m'a donné la chance de préparer ce travail sous sa direction et pour son aide, ses encouragements et pour ses efforts et sa disponibilité et sa patience. Veuillez trouver le témoignage de ma grande reconnaissance et mon profond respect.

Je remercie très sincèrement Monsieur le Professeur S. Houat pour avoir accepté d'être président du jury et pour ses discussions et ses remarques.

Mes remerciements vont également à Madame B. Guettou pour avoir accepté d'évaluer ce travail.

Je tiens un grand remerciement aussi à Monsieur le professeur S. Houat pour les discussions, sa disponibilité et son encouragement et son soutien.

J'exprime mes remerciements à tous mes enseignants pendant toutes les années d'études à l'université de Jijel.

J'adresse mes plus sincères remerciements à Lamri Houria la secrétaire du laboratoire de physique théorique pour les services et l'encouragement,

Mouna

Dédicace

Louange à Allah qui nous a guidés vers cela, et nous ne l'aurions pas atteint s'il n'y a pas de vertu de Dieu sur nous, ni pour ceux qui sont tombés dans leurs bons versets dans le sens du Tout-Puissant, Je remercie mes très chers parents, *S. Ammaret S. Houria*, qui ont toujours été là pour moi, « Vous avez tout sacrifié pour vos enfants n'épargnant ni santé ni efforts. Vous m'avez donné un magnifique modèle de labeur et de persévérance. Je suis redevable d'une éducation dont je suis fier ».

Je remercie mes adorables frères *Hani, Faridet* sa femme *Lamia* et leur fils *Mohamed*,
, et messieurs *Nadjet, Iman, Fadil* et son mari *Riad* et ses fils *Houssam* et *Aminpour* leur encouragement

Je remercie très spécialement *Karima* qui a toujours été là pour moi.

Je n'oublie pas la prunelle de mes yeux et ma petite reine *Shaima*

Enfin, je remercie tous mes Amies que j'aime tant, *Fatima, Amira, Atham, Aïlam, Saida, Chahra* Pour leur sincère amitié et confiance, et à qui je dois ma reconnaissance et mon attachement.

Je remercie ma famille et tous qui l'aide moi près ou loin pour réaliser ce travail.

Table des matières

1	Introduction générale	5
2	Notions mathématiques	8
2.1	Introduction	8
2.2	Fonctions de Green en mécanique quantique	8
2.2.1	Aperçu général	8
2.2.2	Formalisme	9
2.2.3	L'opérateur de parité et opérateur pair	10
2.2.4	Application simple : le potentiel delta de Dirac à une dimension	11
2.3	Méthode des extensions auto-adjointes	13
2.3.1	L'espace de Hilbert	13
2.3.2	Opérateurs sur l'espace de Hilbert	14
2.3.3	Opérateur auto-adjoint et la transformation de Cayley	17
2.3.4	Opérateurs symétriques et espaces de déficiences	18
2.3.5	Théorème de Von Neumann	18
2.3.6	Application : Particule dans un plan où l'origine est supprimé	19
3	Potentiel de Morse à une dimension perturbé par une interaction ponctuelle	21
3.1	Introduction	21
3.2	Le potentiel de Morse à une dimension	22
3.3	Le potentiel de Morse à une dimension perturbé par une interaction ponctuelle	24
4	Potentiel de Pöschl-Teller en présence de l'effet Aharonov-Bohm : Régularisation physique et extension auto-adjointe	28
4.1	Introduction	28

4.2	Effet Aharonov-Bohm	29
4.2.1	Les équations de Maxwell et les transformations de jauge	29
4.2.2	Particule chargée dans un champ électromagnétique	31
4.2.3	L'effet Aharonov-Bohm magnétique	32
4.3	Régularisation physique	33
4.3.1	Formulation du problème	33
4.3.2	Modèle de Hagen	35
4.4	L'approche des extensions auto-adjointes	41
5	Conclusion générale	43



Chapitre 1

Introduction générale

L'interaction ponctuelle, nomée aussi interaction de contact, représentée par une fonction delta de Dirac, est une interaction qui se produit à un ensemble de points discrets (sources) fini ou infini. Cette interaction a été introduite avec succès notamment dans le modèle de Kronig et Penney en physique de l'état solide [1]. En outre, les potentiels à courte portée représentés par des interactions ponctuelles ont été également utilisés pour modéliser l'interaction entre les nucléons [2]. D'autre part, l'équation de Schrödinger unidimensionnelle qui contient une interaction ponctuelle, peut être résolue exactement lorsque l'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien qui ne contient pas l'interaction ponctuelle admet une solution exacte. Cet objectif est atteint en particulier au moyen de fonctions de Green, qui est une technique très efficace et largement utilisée dans de nombreux problèmes de mécanique quantique pour déterminer l'état et le spectre d'énergie associé [3].

Cependant, à plusieurs dimensions l'introduction d'une interaction ponctuelle dans les équations de la mécanique quantique présente des anomalies sous forme des divergences ultraviolettes, dûs principalement au fait que l'Hamiltonien associé n'est pas auto adjoint. Par conséquent, Plusieurs techniques de régularisations ont été utilisées pour lutter contre cette pathologie, par exemple, la régularisation par une coupure "cutoff" [4, 5, 6], la régularisation dimensionnelle [7] où par introduction d'une longueur élémentaire [8] et la régularisation par extension auto-adjointe. Cette dernière technique est une méthode mathématique de régularisation très efficace qui peut être appliquée aux divers systèmes en mécanique quantique relativiste et non relativiste. En effet, Un opérateur agissant dans un espace de Hilbert n'est pas défini seulement par son action mais aussi par son domaine. L'action se réfère à ce que l'opérateur

fait pour les fonctions sur lesquelles il agit. Le domaine est l'ensemble spécifié de fonctions sur lesquelles l'opérateur agit. La distinction entre un opérateur auto-adjoint et un opérateur hermitien n'est pas, en général, mentionnée dans la plupart des livres de la mécanique quantique pour éviter quelques subtilités mathématique. En fait, la distinction a une relation avec le domaine de l'opérateur. En outre, il est important de noter que le choix des domaines qui assure l'auto-adjoint de toutes observables impliquées, tels que la position, l'impulsion, l'Hamiltonien et les générateurs de symétrie, est une partie nécessaire de la quantification et la description d'un système physique en question. Pour une bonne référence sur le sujet voir le livre de D. M. Gitman et ses collaborateurs [9].

En particulier, les systèmes Aharonov-Bohm (AB) [10] avec une interaction sous forme d'une fonction delta de Dirac, qui représente le confinement du champ magnétique dans une région très réduite de l'espace, est un problème qui nécessite une régularisation. En effet, Hagen [11, 12] a proposé un modèle de régularisation physique pour ce champ sous forme d'une fonction delta de Dirac pour étudier la diffusion des particules de spin $1/2$. Il a montré qu'une contribution de cette interaction ne peut être négligée lorsque le spin de la particule est pris en considération, il a montré notamment que certaines solutions qui sont singulières à l'origine deviennent dominantes et par conséquent physiquement acceptables.

Dans ce mémoire, nous allons utiliser deux méthodes de régularisations pour traiter le problème des états liés du potentiel de Pöschl-Teller en présence de l'effet Aharonov-Bohm. La première est une régularisation physique basée sur une rédefinition du terme singulier représenté par une interaction ponctuelle et la deuxième est la technique des extensions auto-adjointes de Bulla et Gesztesy [13]. Le principal but de ce travail est de chercher une relation entre le paramètre arbitraire de l'extension et les paramètres du problème introduits par la régularisation physique. Cette idée est déjà utilisée dans la littérature en considérant d'autres problèmes voir, par exemple, la référence [14].

Outre la présente introduction, ce mémoire contient trois chapitres. Dans le premier chapitre, nous exposons les notions mathématiques nécessaires concernant la méthode de fonctions de Green et la technique des extensions auto-adjointes où nous explicitons le théorème de Van Neumann nécessaire pour savoir s'il existe ou pas de telles extensions. Nous donnons également quelques exemples simples. Puis, dans deuxième chapitre. Au deuxième chapitre, nous allons considérer le potentiel de Morse à une dimension perturbé par des interactions ponctuelles. Le spectre d'énergie est obtenu sous forme d'équation transcendante au moyen de fonctions de

Green. En fin, le troisième chapitre portera sur la régularisation physique et l'extension auto-adjointe pour le problème d'une particule de spin $1/2$ soumise au potentiel de Pöschl-Teller en présence de l'effet AB. Nous terminons ce mémoire par une conclusion générale.

Chapitre 2

Notions mathématiques

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons donner dans la première section, les notions mathématiques nécessaires pour traiter les chapitres suivants. On va commencer par un bref aperçu sur les fonctions de Green, où nous allons montrer comment on peut résoudre d'une manière générale une équation différentielle non homogène au moyen de fonctions de Green. Puis, nous donnons un exemple illustratif traité dans la référence [15]. Nous considérons également la méthode des extensions auto-adjointes d'un opérateur symétrique, qui nécessite la connaissance de certaines notions de l'analyse fonctionnelle concernant les opérateurs et leurs domaines. Ainsi, on va essayer essentiellement d'expliquer dans la deuxième section la différence entre un opérateur hermétique, symétrique et auto-adjoint. Puis, nous donnons le théorème de Von Neumann qui permet de savoir si un opérateur symétrique admet ou pas des extensions auto-adjointes. Nous donnons également une application simple sur ce théorème trouvée dans les références [16, 17].

2.2 Fonctions de Green en mécanique quantique

2.2.1 Aperçu général

Les fonctions de Green ont été introduites par George Green dans les années 1830. C'est un outil mathématique important qui a des applications dans de nombreux domaines de la physique. Ces fonctions ont été appliquées avec succès à l'électromagnétisme classique à la fin du 19^{ème} siècle. Plus récemment, dans le milieu du 20^{ème} siècle, ce sont devenues un outil essentiel

en théorie quantique des champs grâce à l'introduction de la fonction de Green quantique notamment par Feynman dans sa formulation en intégrale de chemin de l'électrodynamique quantique.

2.2.2 Formalisme

Soit l'équation différentielle non homogène définie sur un domaine Ω avec certaines conditions aux limites,

$$[L(\mathbf{r}) - \lambda] \psi(\mathbf{r}) = R(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

où λ est une constante, $R(\mathbf{r})$ le second membre et L est un opérateur différentiel hermétique, indépendant du temps et possède un ensemble complet de fonctions propres $\{\varphi_n(\mathbf{r})\}$, c-à-d,

$$L(\mathbf{r})\varphi_n(\mathbf{r}) = \lambda_n\varphi_n(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

avec

$$\int_{\Omega} \varphi_n^*(\mathbf{r})\varphi_m(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \delta_{n,m} \quad \text{et} \quad \sum_n \varphi_n^*(\mathbf{r})\varphi_n(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.3)$$

Notons qu'en générale n représente un ensemble d'indices qui peuvent prendre soit des valeurs discrètes (pour la partie discrète du spectre de L , si elle existe) et/ou des valeurs continues (pour la partie continue du spectre de L , si elle existe). Pour simplifier, on se limite ici au cas d'un spectre discret.

On suppose maintenant qu'on peut développer les fonctions $\psi(\mathbf{r})$ et $R(\mathbf{r})$ sur la base propre $\{\varphi_n(\mathbf{r})\}$ de l'opérateur L ,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

$$R(\mathbf{r}) = \sum_n d_n \varphi_n(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

puis remplaçons dans l'équation (2.1), on obtient

$$\sum_n [c_n(\lambda_n - \lambda) - d_n] \varphi_n(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.6)$$

Comme les fonctions propres $\varphi_n(\mathbf{r})$ sont linéairement indépendantes, il en résulte l'égalité suivante

$$c_n(\lambda_n - \lambda) - d_n = 0,$$

c'est-à-dire

$$c_n = \frac{d_n}{(\lambda_n - \lambda)}. \quad (2.7)$$

Multiplions l'équation (2.5) par $\varphi_m^*(\mathbf{r})$ et intégrons sur le domaine Ω ,

$$\int_{\Omega} \varphi_m^*(\mathbf{r}) R(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_n d_n \int_{\Omega} \varphi_m^*(\mathbf{r}) \varphi_n(\mathbf{r}) dx,$$

puisque les fonctions $\varphi_n(\mathbf{r})$ forment un ensemble orthogonal, il vient

$$\int_{\Omega} \varphi_n^*(\mathbf{r}) R(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = d_n, \quad (2.8)$$

suite aux équations (2.7), (2.8) et (2.4), la solution de l'équation non homogène (2.1) s'écrit,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n \frac{\varphi_n(\mathbf{r})}{\lambda_n - \lambda} \int_{\Omega} \varphi_n^*(\mathbf{r}') R(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (2.9)$$

La dernière expression peut être mise sous une forme plus compacte comme

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') R(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (2.10)$$

où $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est la fonction de Green définie par

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n \frac{\varphi_n(\mathbf{r}) \varphi_n^*(\mathbf{r}')}{\lambda_n - \lambda}. \quad (2.11)$$

Si on pose maintenant,

$$R(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad (2.12)$$

l'équation (2.10) donne

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0) d\mathbf{r}', = G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0),$$

par conséquent $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est la solution de l'équation non homogène suivante

$$(L - \lambda) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (2.13a)$$

2.2.3 L'opérateur de parité et opérateur pair

La réflexion de l'espace par rapport à l'origine d'un système de coordonnées est appelée inversion ou une opération de parité. L'opérateur de parité P est défini par son action sur les états de l'espace de position comme

$$P\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Cet opérateur vérifie les propriétés suivantes :

$$\text{i) } P^+ = P, \quad \text{ii) } P^2 = I, \quad \text{iii) } P = P^{-1},$$

en outre, les fonctions propres d'un opérateur de parité ont une parité bien définie ; elles sont soit paires ou impaires.

Un opérateur A est dit pair s'il obéit à la condition

$$PAP = A, \tag{2.15}$$

et un opérateur B est dit impair si

$$PBP = -B. \tag{2.16}$$

On peut facilement vérifier que les opérateurs pairs commutent avec l'opérateur de parité P et que les opérateurs impairs anticommulent avec P . Le fait que les opérateurs pairs commutent avec l'opérateur de parité a des conséquences très utiles. En effet, examinons les deux cas importants suivants :

i) Si A est un opérateur, hermétique, pair et aucune de ses valeurs propres n'est dégénérée, alors cet opérateur a les mêmes vecteurs propres que ceux de l'opérateur de parité. Et comme les vecteurs propres de l'opérateur de parité sont soit pairs ou impairs, les vecteurs propres de A doivent également être soit pairs ou impairs ; on dit qu'ils ont une parité déterminée. Cette propriété aura des applications très utiles lorsque nous résolvons l'équation de Schrödinger, pour des Hamiltoniens pairs.

ii) Si un opérateur pair a un spectre dégénéré, ses vecteurs propres ne doivent pas nécessairement avoir une parité définie.

2.2.4 Application simple : le potentiel delta de Dirac à une dimension

Soit l'équation de Schrödinger pour le potentiel delta de Dirac

$$\left[\frac{p^2}{2m} - \alpha\delta(x) \right] \psi(x) = \epsilon\psi(x), \tag{2.17}$$

où ϵ est l'énergie du système et α un paramètre positif, utilisons la relation bien connue

$$\delta(x)\psi(x) = \delta(x)\psi(0), \tag{2.18}$$

l'équation. (2.17) peut s'écrire alors sous la forme

$$\left[\frac{p^2}{2m} - \epsilon \right] \psi(x) = \alpha \psi(0) \delta(x). \quad (2.19)$$

En comparant avec la section précédente, on peut supposer que

$$L = \frac{p^2}{2m}, \quad \lambda = \epsilon \quad \text{et} \quad R(x) = \alpha \psi(0) \delta(x).$$

Les états propres de l'opérateur $p^2/2m$ sont les ondes planes, $\varphi_k(x)$, données par

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ikx), \quad (2.20)$$

où k est le vecteur d'onde. Les valeurs propres correspondantes sont

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (2.21)$$

Dans cet exemple L a un spectre continu, la somme doit être remplacée par une intégrale sur toutes les valeurs continues de k , c'est-à-dire

$$\sum_k \rightarrow \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dk, \quad (2.22)$$

dans ce cas, $G(x, x')$ s'écrit, en tenant compte de (2.11), comme

$$G(x, x') = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varphi_k(x) \varphi_k^*(x')}{\epsilon_k - \epsilon} dk. \quad (2.23)$$

Puis remplaçons l'équation (2.20) et (2.21) dans (2.23), il vient

$$G(x, x') = \frac{m}{\pi \hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[ik(x - x')]}{k^2 + \kappa^2} dk, \quad (2.24)$$

où $\kappa^2 = -2m\epsilon/\hbar^2$. La solution $\psi(x)$ peut être obtenue en utilisant la fonction de Green comme suit

$$\psi(x) = \alpha \psi(0) \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, x') \delta(x') dx', \quad (2.25)$$

soit

$$\psi(x) = \alpha \psi(0) G(x, 0). \quad (2.26)$$

Maintenant posons $x = 0$ dans la dernière équation, nous obtenons la condition de l'état lié du système

$$\frac{1}{\alpha} = G(0, 0). \quad (2.27)$$

puis, utilisons le résultat suivant

$$\int_0^{+\infty} \frac{dk}{k^2 + \kappa^2} = \frac{\pi}{2\kappa}, \quad (2.28)$$

ainsi, l'équation (2.27) donne

$$\kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2}, \quad (2.29)$$

c'est-à-dire

$$\epsilon = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad (2.30)$$

La fonction de Green peut être calculée par la méthode des résidus et en utilisant la relation (2.24), le résultat est

$$G(x, x') = \frac{m}{\hbar^2 \kappa} \exp[-(x - x') \kappa] \quad (2.31)$$

et ensuite on peut calculer la fonction d'onde normalisée à partir de l'équation (2.26), on aboutit alors à

$$\psi(x) = \kappa^{\frac{1}{2}} \exp[-\kappa |x|].$$

2.3 Méthode des extensions auto-adjointes

2.3.1 L'espace de Hilbert

La mécanique quantique est naturellement formulée dans l'espace de Hilbert \mathcal{H} qui est un espace vectoriel analogue aux espaces euclidiens habituels \mathcal{E}_n . Cependant, contrairement à \mathcal{E}_n qui est de dimension finie, l'espace de Hilbert est ∞ -dimensionnel. On peut penser à prendre comme un modèle conceptuel de l'espace de Hilbert une certaine représentation comme celle d'un vecteur dans \mathcal{E}_n , soit (a_1, a_2, \dots, a_n) et de l'écrire par exemple comme $(a_1, a_2, \dots, a_n, \dots)$. Puis, laissant n croître sans limite, nous arrivons à la notion de \mathcal{H} . Mais, contrairement à tout couple ordonné (a_1, a_2, \dots, a_n) qui nécessairement dans \mathcal{E}_n , pas toutes les suites infinies ordonnées peuvent être considérées comme appartenant à \mathcal{H} . La raison de cela est que pas toutes ces suites ont une "longueur" finie et on souhaite inclure dans \mathcal{H} seulement des éléments de longueur finie. Cela revient à dire, dans le langage des fonctions d'onde, qu'on veut une fonction d'onde à carré intégrable. Les physiciens utilisent un espace de Hilbert bien particulier (noté \mathcal{L}_2 par les mathématiciens), ses éléments sont des fonctions $\psi(x)$ réelles ou complexes de carré intégrable. La norme $\|\cdot\|$ dans \mathcal{L}_2 est définie par

$$\|\psi\|^2 = (\psi, \psi) = \int_{\text{espace}} \psi^*(x) \psi(x) dx. \quad (2.32)$$

2.3.2 Opérateurs sur l'espace de Hilbert

Un opérateur sur l'espace de Hilbert est une application qui associe certains éléments de \mathcal{H} dans \mathcal{H} . Ainsi, si \hat{A} est un opérateur dont le domaine est $\mathcal{D}_{\hat{A}} \subset \mathcal{H}$ alors pour $\psi \in \mathcal{D}_{\hat{A}}$ on a :

$$\hat{A}\psi = \varphi \in \mathcal{H} \quad (2.33)$$

Exemple :

soit \mathcal{H} est l'espace \mathcal{L}_2 et \hat{A} est l'opérateur multiplication par x^2 alors :

$$\left(\hat{A}\psi\right) x = x^2\psi(x) \quad (2.34)$$

même si $\psi \in \mathcal{L}_2$ ce n'est pas toutes $x^2\psi(x)$ est dans \mathcal{L}_2 . En effet, on peut s'assurer de cette proposition directement en considérant la fonction :

$$\psi(x) = (x^2 + a^2)^{-m}$$

$\psi(x) \in \mathcal{L}_2$ pour $\text{Re}(m) > 1/4$, mais $x^2\psi(x) = x^2(x^2 + a^2)^{-m}$ n'est pas dans \mathcal{L}_2 sauf si $\text{Re}(m) > 5/4$.

Définitions :

i) Un opérateur \hat{A} est dit linéaire si pour tout $\psi, \varphi \in \mathcal{D}_{\hat{A}}$ on a :

$$\hat{A}(\lambda\psi + \mu\varphi) = \lambda\hat{A}\psi + \mu\hat{A}\varphi. \quad (2.35)$$

On va s'intéresser plus précisément aux opérateurs linéaires, puisque, en mécanique quantique, les quantités physiques sont représentées par des opérateurs linéaires.

ii) L'image $\mathcal{R}_{\hat{A}}$ d'un opérateur \hat{A} est définie comme étant l'ensemble de tous les vecteurs obtenus en agissant \hat{A} sur les éléments de $\mathcal{D}_{\hat{A}}$. On écrit symboliquement :

$$\mathcal{R}_{\hat{A}} = \hat{A}\mathcal{D}_{\hat{A}}. \quad (2.36)$$

Si \hat{A} et \hat{B} sont deux opérateurs de domaines $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ et $\mathcal{D}_{\hat{B}}$ avec $\mathcal{R}_{\hat{A}} \subset \mathcal{R}_{\hat{B}}$, on peut définir le produit d'opérateurs $\hat{B}\hat{A}$ comme :

$$\left(\hat{B}\hat{A}\right)\psi = \hat{B}\left(\hat{A}\psi\right). \quad (2.37)$$

Qui est bien défini puisque par supposition $\psi \in \mathcal{D}_{\hat{A}}$ donc $\hat{A}\psi \in \mathcal{R}_{\hat{A}} \subset \mathcal{R}_{\hat{B}}$ et par suite $\hat{A}\psi \in \mathcal{D}_{\hat{B}}$.

Inversement, si $\mathcal{R}_{\hat{B}} \subset \mathcal{R}_{\hat{A}}$ on peut définir le produit

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)\psi = \hat{A}\left(\hat{B}\psi\right). \quad (2.38)$$

Notons ici que, même si $\hat{B}\hat{A}$ peut exister en tant qu'opérateur $\hat{A}\hat{B}$ peut-être pas, et inversement.

iii) Soit \hat{A} un opérateur sur \mathcal{H} et $\psi \in \mathcal{D}_{\hat{A}}$ et considérons l'expression $(\varphi, \hat{A}\psi)$. Alors, si pour un vecteur $\varphi \in \mathcal{H}$ on obtient un vecteur $\chi \in \mathcal{H}$ de façon qu'on a l'égalité :

$$(\varphi, \hat{A}\psi) = (\chi, \psi) \quad (2.39)$$

pour tous les vecteurs $\psi \in \mathcal{D}_{\hat{A}}$. On définit ainsi l'opérateur adjoint \hat{A}^+ of \hat{A} par :

$$\chi = \hat{A}^+\varphi \quad (2.40)$$

avec le domaine

$$\mathcal{D}_{\hat{A}^+} = \left\{ \text{l'ensemble de tous les vecteurs } \varphi \text{ pour que l'égalité } (\varphi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^+\varphi, \psi) \text{ soit vérifiée} \right\}$$

iv) Un ensemble de \mathcal{H} est dit dense dans \mathcal{H} si tout élément de \mathcal{H} peut être approximé d'une façon arbitrairement proche par un élément de cet ensemble. Ainsi, $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ est dense si pour tout $\varphi \in \mathcal{H}$, il existe un $\psi \in \mathcal{D}_{\hat{A}}$ tel que

$$\forall \varepsilon > 0, \|\psi - \varphi\| < \varepsilon \quad (2.41)$$

v) L'opérateur \hat{A} de domaine $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ est dit hermétique si pour tout ψ et φ dans $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ on a :

$$(\varphi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\varphi, \psi). \quad (2.42)$$

vi) L'opérateur \hat{A} de domaine $\mathcal{D}_{\hat{A}} \subset \mathcal{H}$ est dit symétrique s'il est hermétique et son domaine $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ est dense dans \mathcal{H} .

A partir de la définition de \hat{A}^+ , alors pour un opérateur symétrique \hat{A} on a :

$$\mathcal{D}_{\hat{A}} \subset \mathcal{D}_{\hat{A}^+} \quad (2.43)$$

vii) L'opérateur \hat{A} de domaine $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ est dit auto-adjoint s'il est symétrique et de plus on a :

$$\mathcal{D}_{\hat{A}} = \mathcal{D}_{\hat{A}^+}. \quad (2.44)$$

Exemple :

Pour bien comprendre la différence entre ces définitions abstraites, on considère l'opérateur impulsion à une dimension $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ défini sur l'espace de Hilbert $\mathcal{L}_2([0, \ell])$, pour une particule se déplaçant sur un intervalle fini $[0, \ell]$. Prenons comme domaine $\mathcal{D}_{\hat{p}}$ l'espace suivant :

$$\mathcal{D}_{\hat{p}} = \{\psi(x), \psi'(x) \in \mathcal{L}_2([0, \ell]), \psi(0) = \psi(\ell) = 0\} \quad (2.45)$$

Le domaine \mathcal{D}_p est dense dans $\mathcal{L}_2([0, \ell])$. Donc si \hat{p} est hermétique alors il est symétrique.

Ainsi, pour que \hat{p} soit hermétique il faut que l'égalité suivante soit vérifiée :

$$(\varphi, \hat{p}\psi) = (\hat{p}\varphi, \psi), \quad (2.46)$$

explicitement on a :

$$\begin{aligned} (\varphi, \hat{p}\psi) - (\hat{p}\varphi, \psi) &= -i\hbar \int_0^\ell \varphi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx - i\hbar \int_0^\ell \frac{d\varphi^*(x)}{dx} \psi(x) dx \\ &= -i\hbar \int_0^\ell d[\varphi^*(x)\psi(x)] = -i\hbar [\varphi^*(x)\psi(x)]_0^\ell \\ &= -i\hbar [\varphi^*(\ell)\psi(\ell) - \varphi^*(0)\psi(0)] = 0 \end{aligned} \quad (2.47)$$

ce qui prouve que \hat{p} est hermétique. Mais \hat{p} n'est pas auto-adjoint même si son adjoint \hat{p}^+ a la même expression formelle ($\hat{p}^+ = -i\hbar \frac{d}{dx}$) puisque le domaine $\mathcal{D}_{\hat{p}^+}$ de \hat{p}^+ est plus large. En effet :

$$\mathcal{D}_{\hat{p}^+} = \{\varphi(x), \varphi'(x) \in \mathcal{L}_2([0, \ell]), \text{ aucune autre restriction sur } \varphi(x)\} \quad (2.48)$$

autrement dit l'opérateur \hat{p} et \hat{p}^+ n'ont pas le même domaine, de plus il est facile de voir que $\mathcal{D}_{\hat{p}} \subset \mathcal{D}_{\hat{p}^+}$. Malgré ceci, on peut chercher des extensions de l'opérateur \hat{p} de manière qu'il soit auto-adjoint. On va donc modifier légèrement le domaine (2.45) en introduisant un paramètre libre noté λ dans les conditions aux limites, c'est-à-dire au lieu de prendre $\psi(0) = \psi(\ell)$ on pose :

$$\psi(\ell) = \lambda\psi(0), \quad \lambda \in \mathbb{C} \quad (2.49)$$

dans ce cas, la relation (2.47) s'écrit :

$$(\varphi, \hat{p}\psi) - (\hat{p}\varphi, \psi) = -i\hbar [\varphi^*(\ell)\lambda - \varphi^*(0)] \psi(0)$$

pour que \hat{p} soit hermétique on pose :

$$\varphi^*(\ell)\lambda - \varphi^*(0) = 0 \Rightarrow \varphi(\ell) = \frac{1}{\lambda^*} \varphi(0)$$

on veut que les fonctions φ ont les mêmes conditions aux limites comme celles des fonctions ψ , il est nécessaire alors que $\frac{1}{\lambda^*} = \lambda$ c'est-à-dire le paramètre complexe λ est une phase i.e, $\lambda = e^{i\theta}$, $\theta \in [0, 2\pi]$. Dans ce cas on bien $\mathcal{D}_{\hat{p}} = \mathcal{D}_{\hat{p}^+}$ avec :

$$\mathcal{D}_{\hat{p}}(\theta) = \{\psi(x), \psi'(x) \in \mathcal{L}_2([0, \ell]), \psi(\ell) = e^{i\theta} \psi(0)\} \quad (2.50)$$

L'opérateur $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ défini sur le domaine $\mathcal{D}_{\hat{p}}(\theta)$, pour un angle θ donné, est l'extension auto-adjointe de l'opérateur \hat{p} .

En outre, le spectre de l'opérateur auto-adjoint \hat{p} est purement discret. En effet, utilisons la condition au limite (2.50), les valeurs propres $\lambda_n(\theta)$ et les fonctions propres $\psi_n(x, \theta)$ de \hat{p} sont facilement obtenues comme solution de l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\hat{p}\psi_n(x, \theta) = \lambda_n(\theta) \psi_n(x, \theta),$$

ainsi

$$\begin{cases} \psi_n(x, \theta) = \frac{1}{\sqrt{\ell}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \lambda_n(\theta) x\right), & n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ \lambda_n(\theta) = \frac{(2\pi n + \theta)\hbar}{\ell}. \end{cases} \quad (2.51)$$

Conclusion : Un opérateur hermétique symétrique donné n'est pas automatiquement un opérateur auto-adjoint. Un opérateur hermétique symétrique \hat{A} de domaine $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ est dit auto-adjoint si $\mathcal{D}_{\hat{A}} = \mathcal{D}_{\hat{A}^+}$. Il peut avoir aucune, unique ou une infinité d'extensions auto-adjointes. Le théorème du mathématicien John von Neumann, qu'on va le donner dans la section (8), explicite bien la dernière proposition.

2.3.3 Opérateur auto-adjoint et la transformation de Cayley

Rappelons avant d'énoncer le théorème de Cayley, que l'opération analogue à une rotation dans l'espace Euclidien \mathcal{E}_n et la transformation unitaire dans \mathcal{H} . La propriété caractéristique d'une rotation dans \mathcal{E}_n est qu'elle préserve la longueur et les angles ou d'une manière plus compacte, elle préserve le produit scalaire. Ceci est également sa caractéristique dans \mathcal{H} .

Donc une transformation \hat{U} est unitaire ssi $\mathcal{D}_{\hat{U}} = \mathcal{R}_{\hat{U}} = \mathcal{H}$ et

$$(\hat{U}\psi, \hat{U}\psi) = (\psi, \psi). \quad (2.52)$$

Ce qui implique que $\hat{U}^+\hat{U} = 1$. De plus, comme $\mathcal{D}_{\hat{U}} = \mathcal{R}_{\hat{U}} = \mathcal{H} \Rightarrow \hat{U}\hat{U}^+ = 1$.

Théorème : L'opérateur \hat{A} de domaine $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ est auto-adjoint ssi sa transformation de Cayley suivante

$$\hat{U} = (\hat{A} - i\hat{I}) (\hat{A} + i\hat{I})^{-1} \quad (2.53)$$

est unitaire.

2.3.4 Opérateurs symétriques et espaces de déficiences

On suppose que \hat{A} est un opérateur symétrique arbitraire (pas nécessairement auto-adjoint). Dans ce cas, la transformation de Cayley correspondante \hat{U} n'a pas besoin d'être unitaire et le domaine $\mathcal{D}_{\hat{U}}$ et l'image $\mathcal{R}_{\hat{U}} = \hat{U}\mathcal{D}_{\hat{U}}$ n'a pas besoin également de coïncider avec la totalité de l'espace de Hilbert \mathcal{H} .

Considérons les ensembles des vecteurs $\mathcal{D}_{\hat{U}}^\perp$ et $\mathcal{R}_{\hat{U}}^\perp$ orthogonaux à $\mathcal{D}_{\hat{U}}$ et $\mathcal{R}_{\hat{U}}$. Ces ensembles nous donnent une indication sur les domaines où \hat{U} n'est pas unitaire et \hat{A} n'est pas auto-adjoint. En fait, ces ensembles sont en effet des sous espaces appelés espaces de déficiences de l'opérateur \hat{A} , les dimensions de ces espaces sont appelées indices de déficiences.

2.3.5 Théorème de Von Neumann

Soit un opérateur symétrique \hat{A} de domaine $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ et soit son adjoint \hat{A}^+ de domaine $\mathcal{D}_{\hat{A}^+}$. On définit les deux sous espaces suivants :

$$\begin{aligned}\mathcal{N}_+ &= \left\{ \psi \in \mathcal{D}_{\hat{A}^+}, \hat{A}^+\psi = i\lambda\psi \right\} \\ \mathcal{N}_- &= \left\{ \psi \in \mathcal{D}_{\hat{A}^+}, \hat{A}^+\psi = -i\lambda\psi \right\}\end{aligned}$$

où λ est paramètre réel positif introduit pour des raisons de dimensions. On appelle indices de déficience les nombres n_+ et n_- tels que :

$$\begin{aligned}n_+ &= \dim \mathcal{N}_+ \\ n_- &= \dim \mathcal{N}_-\end{aligned}$$

pour un opérateur \hat{A} d'indices de déficience (n_+, n_-) on a les trois possibilités suivantes :

1) Si $n_+ = n_- = 0$, alors \hat{A} est un opérateur auto-adjoint (on dit aussi que l'opérateur \hat{A} est essentiellement auto-adjoint).

2) Si $n_+ = n_- = n \geq 1$, alors il existe une famille à n^2 paramètres réels d'extension auto-adjointes $\{\hat{A}_U\}$. Chaque extension auto-adjointe \hat{A}_U est déterminée par une transformation unitaire \hat{U} (une isométrie ou une matrice unitaire $n \times n$) $\hat{U} : \mathcal{N}_+ \rightarrow \mathcal{N}_-$

$$\mathcal{D}_{\hat{A}_U} = \{ \psi_U, \psi_U = \varphi + (\psi + U \psi), \forall \varphi \in \mathcal{D}_{\hat{A}}, \forall \psi \in \mathcal{N}_+, \forall U \psi \in \mathcal{N}_- \}$$

3) Si $n_+ \neq n_-$, alors \hat{A} n'admit pas une extension auto-adjointe.

2.3.6 Application : Particule dans un plan où l'origine est supprimé

Comme application du théorème de Von Neumann, on va considérer une particule de masse m dans un plan où l'origine des coordonnées est supprimé. On s'intéresse ici à la partie radiale de l'opérateur Hamiltonien (les ondes s , i.e., $\ell = 0$), qui s'écrit en coordonnées polaires comme suit :

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right). \quad (2.54)$$

Ainsi \hat{H} est défini sur un ensemble $\Omega \subset \mathcal{L}_2(\mathbb{R}^+ / \{0\}, r dr)$ où ses fonctions sont infiniment dérivables et qui s'annulent au voisinage de $r = 0$. Il est facile de vérifier que \hat{H} est hermétique. En effet :

$$\left(\hat{H}\varphi, \psi \right) - \left(\varphi, \hat{H}\psi \right) = \lim_{r \rightarrow 0} r \left(\frac{d\varphi^*(r)}{dr} \psi(r) - \varphi^*(r) \frac{d\psi(r)}{dr} \right) = 0. \quad (2.55)$$

le second membre est nul pour toute valeur de $\varphi^*(r)$ et $d\varphi^*(r)/dr$. Le domaine de l'opérateur adjoint est toute fonction $\varphi(r)$ absolument continue de $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^+ / \{0\}, r dr)$. Pour voir si cet opérateur admet des extensions auto-adjointes, nous devons examiner les solutions de l'équation :

$$\hat{H}^+ \psi_{\pm}(r) = \pm i \lambda \psi_{\pm}(r), \quad \lambda > 0 \quad (2.56)$$

c'est-à-dire

$$-\frac{d^2}{dr^2} \psi_{\pm}(r) - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \psi_{\pm}(r) - (\pm i) \lambda \psi_{\pm}(r) = 0. \quad (2.57)$$

Les solutions normalisées sont :

$$\psi_{\pm}(r) = K_0 \left[e^{\mp i(\pi/4)} (2m\lambda)^{1/2} r \right]. \quad (2.58)$$

où K_0 est la fonction de Bessel modifiée de deuxième espèce d'ordre zéro. Donc $n_+ = n_- = 1$ et d'après le théorème de Von Neumann, il existe une famille d'extension auto-adjointes à un paramètre $\alpha = e^{i\theta}$, $\theta \in [0, 2\pi]$.

Les conditions aux limites sont obtenues à partir de l'égalité :

$$\left(\hat{H} [\psi_+(r) + \alpha \psi_-(r)], \psi \right) = \left(\psi_+(r) + \alpha \psi_-(r), \hat{H}\psi \right), \quad (2.59)$$

qui garantit que ψ est dans le domaine auto-adjoint. Ainsi, (2.59) se réduit à :

$$\lim_{r \rightarrow 0} r \left(\frac{d(\psi_+(r) + e^{i\theta} \psi_-(r))^*}{dr} \psi(r) - (\psi_+(r) + e^{i\theta} \psi_-(r))^* \frac{d\psi(r)}{dr} \right) = 0. \quad (2.60)$$

On remplace $\psi_{\pm}(r)$ en utilisant l'équation (2.58) et en prenant compte du comportement à l'origine des fonctions :

$$K_0(z) \sim -\ln \frac{z}{2} - \gamma,$$

$$K_1(z) \sim \frac{1}{z},$$

où $\gamma = 0,5772$ est la constante d'Euler, et utilisons également la relation [18]

$$\frac{d}{dz} K_0(z) = -K_1(z),$$

nous arrivons à :

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left\{ \psi(r) - r \frac{d\psi(r)}{dr} \{\ln r + \beta\} \right\} = 0, \quad (2.61)$$

où $\beta = -(\pi/4) \tan(\theta/2) + \ln(m\lambda) + \gamma$ est une constante.

Comme $r \rightarrow 0$, on peut écrire

$$r \frac{d\psi(r)}{dr} = \psi(r) - \lim_{r' \rightarrow 0} \left(\frac{\psi(r)}{\ln r'} \right) \ln r' \quad (2.62)$$

remplaçons (2.62) dans (2.61), on obtient :

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left\{ \psi(r) - \psi(r) \ln r + \lim_{r' \rightarrow 0} \left(\frac{\psi(r)}{\ln r'} \right) \ln r' \ln r - \beta \psi(r) + \beta \lim_{r' \rightarrow 0} \left(\frac{\psi(r)}{\ln r'} \right) \ln r' \right\} = 0, \quad (2.63)$$

puisque $\lim_{r \rightarrow 0} (\ln r) \rightarrow -\infty$, on peut négliger le dernier terme devant le troisième. La relation (2.63) devient :

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left\{ \psi(r) - \psi(r) \ln r + \lim_{r' \rightarrow 0} \left(\frac{\psi(r)}{\ln r'} \right) \ln r' \ln r - \beta \psi(r) \right\} = 0. \quad (2.64)$$

Réécrivons la dernière relation sous la forme

$$\lim_{r \rightarrow 0} \ln r \left\{ (1 - \beta) \frac{\psi(r)}{\ln r} - \psi(r) + \lim_{r' \rightarrow 0} \left(\frac{\psi(r)}{\ln r'} \right) \ln r' \right\} = 0. \quad (2.65)$$

alors il est nécessaire qu'on a :

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left\{ (1 - \beta) \frac{\psi(r)}{\ln r} - \psi(r) + \lim_{r' \rightarrow 0} \left(\frac{\psi(r)}{\ln r'} \right) \ln r' \right\} = 0. \quad (2.66)$$

En fin, faisons le changement $\psi(r) = r^{-1/2} \phi(r)$, on obtient

$$\lim_{r \rightarrow 0} \mu \frac{\phi(r)}{r^{1/2} \ln r} - \lim_{r \rightarrow 0} \left(\frac{\phi(r)}{r^{1/2}} - \lim_{r' \rightarrow 0} \left(\frac{\phi(r)}{r^{1/2} \ln r'} \right) \ln r' \right) = 0. \quad (2.67)$$

où $\mu = 1 - \beta$ est un paramètre réel arbitraire. Les conditions aux limites de la famille d'extension auto-adjoints à un paramètre sont données par :

$$\lim_{r \rightarrow 0} \mu \frac{\phi(r)}{r^{1/2} \ln r} - \lim_{r \rightarrow 0} \left(\frac{\phi(r)}{r^{1/2}} - \lim_{r' \rightarrow 0} \left(\frac{\phi(r)}{r^{1/2} \ln r'} \right) \ln r' \right) = 0. \quad (2.68)$$

Le lecteur peut consulter aussi la référence [19].

Chapitre 3

Potentiel de Morse à une dimension perturbé par une interaction ponctuelle

3.1 Introduction

Le potentiel Morse est l'un des modèles empiriques les plus utiles et les plus pratiques, qui donne une excellente description qualitative de l'interaction entre deux atomes dans une molécule diatomique [20]. C'est une meilleure approximation pour la structure vibrationnelle de la molécule que celle de l'oscillateur harmonique car il comprend de manière explicite les effets d'une rupture de liaison. Récemment, Mahlanen et collaborateurs [21] ont utilisé ce modèle pour décrire les potentiels inter-atomiques C-C, C-X, X-X (où X=F, Cl, Br). Ce potentiel est donné par l'expression

$$V(x) = D_e (e^{-2\beta(x-x_e)} - 2e^{-\beta(x-x_e)}) \quad (3.1)$$

où D_e est l'énergie de dissociation, et x_e la distance d'équilibre inter-atomique et β un paramètre de contrôle (ajustable). A une dimension x prend les valeurs $-\infty \leq x \leq +\infty$. Cependant, pour des molécules réelles x varie entre 0 et ∞ (représente la distance radiale r) voir figure ci-dessous.

Dans ce chapitre, nous allons considérer le problème des états liés d'une particule soumise à un potentiel de Morse perturbé par une interaction ponctuelle en utilisant la méthode de fonctions de Green vue au chapitre précédent. Le présent travail est motivé par le récent papier de H. Erkola et E. Demiralp [22]. Comme a été mentionné par ces auteurs, l'interaction ponctuelle

peut être utilisé pour décrire des potentiels réalistes qui ont à approximativement la forme du potentiel de Morse, mais qui présentent certaines déviations locales par rapport au potentiel de Morse. Par exemple, le modèle peut être utilisé pour décrire l'interaction inter-atomique H-H comme le potentiel de Morse, et l'interaction entre H_2 et la cage sphérique C_{60} comme interaction ponctuelle.

3.2 Le potentiel de Morse à une dimension

Considérons une particule de masse m soumise à un potentiel de Morse à une dimension donné par (3.1). L'équation de Schrodinger correspondante a la forme suivante :

$$\left\{ \frac{p^2}{2m} + D_e (e^{-2\beta(x-x_e)} - 2e^{-\beta(x-x_e)}) \right\} \varphi(x) = \epsilon \varphi(x). \quad (3.2)$$

on va prendre, pour simplifier, $x_e = 0$. Cette équation se réécrit comme

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \lambda^2 (e^{-2\beta x} - 2e^{-\beta x}) - \kappa^2 \right] \varphi(x) = 0 \quad (3.3)$$

où

$$\kappa^2 = -\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} > 0, \quad \frac{2mD_e}{\hbar^2} = \lambda^2 \quad (3.4)$$

Pour résoudre cette équation, on adopte le changement de variable suivant :

$$z = \frac{2\lambda}{\beta} e^{-\beta x} \quad (3.5)$$

ainsi

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi}{dx} &= -\beta z \frac{d\varphi}{dz} \\ \frac{d^2\varphi}{dx^2} &= \beta^2 z \frac{d\varphi}{dz} + \beta^2 z^2 \frac{d^2\varphi}{dz^2}, \end{aligned}$$

et par suite l'équation (3.3) devient

$$z^2 \frac{d^2\varphi}{dz^2} + z \frac{d\varphi}{dz} + \left(-\frac{1}{4} z^2 + \frac{\lambda}{\beta} z - \gamma^2 \right) \varphi = 0, \quad (3.6)$$

où $\gamma = \frac{\kappa}{\beta}$. Pour transformer la dernière équation à une équation différentielle connue, on utilise la décomposition suivante

$$\varphi = z^\gamma e^{-\frac{1}{2}z} f(z), \quad (3.7)$$

en remplaçant (3.7) dans l'équation (3.6), on aboutit à l'équation :

$$z \frac{d^2 f(z)}{dz^2} + (2\gamma + 1 - z) \frac{df(z)}{dz} + \left(\frac{\lambda}{\beta} - \gamma - \frac{1}{2} \right) f(z) = 0, \quad (3.8)$$

qui est une équation de type hypergéométrique confluyente de la forme

$$z \frac{d^2 f(z)}{dz^2} + (c - z) \frac{df(z)}{dz} - af(z) = 0, \quad (3.9)$$

où

$$c = 2\gamma + 1, \quad a = \left(\frac{1}{2} + \gamma - \frac{\lambda}{\beta} \right), \quad (3.10)$$

la solution générale de (3.8) est la combinaison suivante :

$$f(z) = A\Phi(a, c; z) + Bz^{1-c}\Phi(a - c + 1, 2 - c; z), \quad (3.11)$$

où A et B sont des constantes. Ainsi, la solution complète φ est :

$$\varphi = \{Az^\gamma\Phi(a, c; z) + Bz^{1-c+\gamma}\Phi(a - c + 1, 2 - c; z)\} e^{-\frac{1}{2}z} \quad (3.12)$$

Pour avoir une solution finie lorsque $x \rightarrow \infty$, c'est-à-dire $z \rightarrow 0$. On doit poser $B = 0$ puisque :

$$1 - c + \gamma = -\gamma < 0 \quad (3.13)$$

De plus, la série Φ se comporte comme e^z pour des grandes valeurs de z , donc nous devons mettre :

$$a = -n, \quad n = 0, 1, \dots \quad (3.14)$$

la solution finie de (3.2) est donc

$$\varphi_n(z) = Az^\gamma e^{-\frac{1}{2}z} \Phi(-n, c; z) \quad (3.15)$$

qui s'écrit explicitement en utilisant la relation

$$\Phi(-n, c; z) = \frac{n!}{(c)_n} L_n^{c-1}(z) \quad (3.16)$$

de la façon suivante

$$\varphi_n(x) = A \frac{n!}{(2\gamma + 1)_n} \left(\frac{2\lambda}{\beta} \right)^\gamma e^{-\gamma\beta x} \exp\left(-\frac{\lambda}{\beta} e^{-\beta x}\right) L_n^{2\gamma} \left(\frac{2\lambda}{\beta} e^{-\beta x} \right) \quad (3.17)$$

La constante de normalisation A se calcule facilement au moyen de la formule [23]

$$\int_0^{+\infty} z^{2\gamma-1} e^{-z} [L_n^{2\gamma}(z)]^2 dz = \frac{(2\gamma + 1)_n \Gamma(2\gamma)}{n!} \quad (3.18)$$

ainsi on obtient la solution normalisée suivante

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\beta \frac{n!}{\Gamma(2\gamma)(2\gamma+1)_n}} \left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)^\gamma e^{-\gamma\beta x} \exp\left(-\frac{\lambda}{\beta}e^{-\beta x}\right) L_n^{2\gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}e^{-\beta x}\right) \quad (3.19)$$

Le spectre est déduit de la condition de quantification (3.14) et en utilisant les expressions (3.4), on obtient :

$$\epsilon_n = -\frac{\hbar^2\beta^2}{2m} \left(n + \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{\beta}\right)^2 \quad (3.20)$$

ou bien

$$\epsilon_n = -D_e + \frac{\hbar^2\beta\lambda}{m} \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\beta^2\hbar^2}{2m} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \quad (3.21)$$

Notons que la correction inharmonique à l'énergie relative à l'oscillateur harmonique est proportionnelle à n^2 .

3.3 Le potentiel de Morse à une dimension perturbé par une interaction ponctuelle

On considère maintenant une particule de masse m soumise à un potentiel de Morse à une dimension en présence d'une interaction ponctuelle représentée par une fonction delta de Dirac attractive (i.e, $-\alpha < 0$). Le système est décrit par l'équation de Schrödinger suivante

$$\left\{ \frac{p^2}{2m} + D(e^{-2\beta x} - 2e^{-\beta x}) - \alpha\delta(x) \right\} \psi(x) = \epsilon\psi(x). \quad (3.22)$$

avec $x_e = 0$. Cette équation peut se transformer à une équation différentielle non homogène comme suit

$$\left[\frac{p^2}{2m} + D(e^{-2\beta x} - 2e^{-\beta x}) - \epsilon \right] \psi(x) = \alpha\psi(0)\delta(x). \quad (3.23)$$

La solution pour $\alpha = 0$ est donnée dans la section précédente par (3.19). Ainsi, la solution de (3.23) est donnée, suite à (2.10), par

$$\psi(x) = \alpha\psi(0) \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, x')\delta(x')dx', \quad (3.24)$$

où la fonction de Green est

$$G(x, x') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n(x)\varphi_n^*(x')}{\epsilon_n - \epsilon}. \quad (3.25)$$

L'expression (3.24) se réduit à

$$\psi(x) = \alpha\psi(0)G(x, 0), \quad (3.26)$$

posons $x = 0$ on obtient la condition

$$\frac{1}{\alpha} = G(0,0) \quad (3.27)$$

Calculons maintenant $G(0,0)$. Tenant compte de (3.19), on a directement :

$$\varphi_n(0) = \sqrt{\beta \frac{n!}{\Gamma(2\gamma)(2\gamma+1)_n}} \left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)^\gamma \exp\left(-\frac{\lambda}{\beta}\right) L_n^{2\gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)$$

et par suite (3.27) s'écrit

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{\beta}{\Gamma(2\gamma)} \left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)^{2\gamma} \exp\left(-\frac{2\lambda}{\beta}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n!) \left[L_n^{2\gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)\right]^2}{(2\gamma+1)_n (\epsilon_n - \epsilon)}$$

On peut écrire la dernière égalité en remplaçant l'expression de ϵ_n à partir de (3.20) comme suit

$$\frac{1}{\alpha} = -\frac{4m\gamma\beta}{\hbar^2\beta^2} \left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)^{2\gamma} \exp\left(-\frac{2\lambda}{\beta}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n!) \left[L_n^{2\gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)\right]^2}{\Gamma(2\gamma+1+n) \left\{ \left(n + \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{\beta}\right)^2 - \sigma^2 \right\}} \quad (3.28)$$

où on a introduit l'abréviation

$$\frac{2m\epsilon}{\hbar^2\beta^2} = -\sigma^2, \quad (\epsilon < 0) \quad (3.29)$$

Dans le but de calculer la série précédente, on utilise la décomposition suivante

$$\frac{1}{\left(n + \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{\beta}\right)^2 - \sigma^2} = -\frac{1}{2\sigma} \left(\frac{1}{n + \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{\beta} + \sigma} - \frac{1}{n + \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{\beta} - \sigma} \right)$$

Ainsi, la série dans (3.28) peut être se récrire de la façons suivante

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{2m\gamma}{\sigma\hbar^2\beta} \left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)^{2\gamma} \exp\left(-\frac{2\lambda}{\beta}\right) \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n!) \left[L_n^{2\gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)\right]^2}{\Gamma(2\gamma+1+n)} \frac{1}{n + \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{\beta} + \sigma} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n!) \left[L_n^{2\gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)\right]^2}{\Gamma(2\gamma+1+n)} \frac{1}{n + \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{\beta} - \sigma} \right\} \quad (3.30)$$

puis notons que

$$\frac{1}{n + \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{\beta} \pm \sigma} = \int_0^1 t^{n + \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{\beta} \pm \sigma - 1} dt$$

Ainsi, on peut écrire

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{2m\gamma}{\sigma\hbar^2\beta} \left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)^{2\gamma} \exp\left(-\frac{2\lambda}{\beta}\right) \left\{ \int_0^1 t^{-\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{\beta}+\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n!) \left[L_n^{2\gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)\right]^2}{\Gamma(2\gamma+1+n)} t^n dt - \int_0^1 t^{-\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{\beta}-\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n!) \left[L_n^{2\gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)\right]^2}{\Gamma(2\gamma+1+n)} t^n dt \right\} \quad (3.31)$$

La série dans la dernière équation se calcule en utilisant la formule de Hille et Hardy [24]

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n! e^{-\frac{1}{2}(x+y)} (xy)^{\frac{1}{2}\nu} L_n^\nu(x) L_n^\nu(y)}{\Gamma(\nu+n+1)} t^n = \frac{t^{-\frac{1}{2}\nu}}{1-t} \exp\left(-\frac{1}{2}(x+y) \frac{1+t}{1-t}\right) I_\nu\left(2\frac{\sqrt{xyt}}{1-t}\right) \quad (3.32)$$

il vient

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{2m\gamma}{\sigma\beta\hbar^2} (I_+ - I_-) \quad (3.33)$$

où

$$I_{\pm} = \int_0^1 \left(\frac{t^{-\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{\beta}\pm\sigma-\gamma}}{1-t} \exp\left(-\frac{2\lambda}{\beta} \frac{1+t}{1-t}\right) I_{2\gamma}\left(\frac{4\lambda\sqrt{t}}{\beta(1-t)}\right) \right) dt \quad (3.34)$$

Pour calculer les intégrales (3.34), faisons premièrement le changement $t = y^2$ nous obtenons

$$I_{\pm} = 2 \int_0^1 \frac{y^{-2\gamma-2\frac{\lambda}{\beta}\pm 2\sigma}}{1-y^2} \exp\left(-\frac{2\lambda}{\beta} \frac{1+y^2}{1-y^2}\right) I_{2\gamma}\left(\frac{4\lambda}{\beta} \frac{y}{1-y^2}\right) dy$$

Puis utilisant la formule [23]

$$\int_0^1 \frac{y^{\rho-1}}{1-y^2} \exp\left(-b \frac{1+y^2}{1-y^2}\right) I_\nu\left(\frac{2cy}{1-y^2}\right) dy = -\frac{1}{2c} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}(\rho+\nu)\right)}{\Gamma(\nu+1)} M_{(1-\rho)/2, \nu/2}(z_-) W_{(1-\rho)/2, \nu/2}(z_-)$$

avec $z_{\pm} = b \pm \sqrt{b^2 - c^2}$

dans laquelle M et W sont les fonctions de Whittaker. Ainsi, on obtient

$$I_{\pm} = -\frac{\beta}{2\lambda} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{\beta}\pm\sigma\right)}{\Gamma(2\gamma+1)} M_{\gamma+\frac{\lambda}{\beta}\mp\sigma, \gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right) W_{\gamma+\frac{\lambda}{\beta}\mp\sigma, \gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right)$$

Par conséquent l'équation (3.33) s'écrit explicitement

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{m\gamma}{\lambda\sigma\hbar^2\Gamma(2\gamma+1)} \left\{ \Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{\beta}-\sigma\right) M_{\gamma+\frac{\lambda}{\beta}+\sigma, \gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right) W_{\gamma+\frac{\lambda}{\beta}+\sigma, \gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right) - \Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{\beta}+\sigma\right) M_{\gamma+\frac{\lambda}{\beta}-\sigma, \gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right) W_{\gamma+\frac{\lambda}{\beta}-\sigma, \gamma}\left(\frac{2\lambda}{\beta}\right) \right\} \quad (3.35)$$



Cas particulier :

Observons que pour $\alpha = 0$, le côté droit de l'équation (3.35) diverge. Cette divergence est compensée par les pôles des fonctions gamma dans le numérateur, c'est-à-dire

$$\frac{1}{2} - \frac{\lambda}{\beta} \pm \sigma = -n, \quad (3.36)$$

et par suite nous récupérons le spectre d'énergie du potentiel de Morse obtenu dans la section précédente :

$$\epsilon_n = -\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} \left(n + \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{\beta} \right)^2 \quad (3.37)$$

L'équation transcendante d'énergie (3.35) peut être résolue graphiquement.

Chapitre 4

Potentiel de Pöschl-Teller en présence de l'effet Aharonov-Bohm : Régularisation physique et extension auto-adjointe



4.1 Introduction

Le potentiel de Pöschl-Teller [25] est un modèle largement utilisé pour décrire certaines molécules diatomiques et des systèmes quantiques à plusieurs corps [26]. Ce potentiel est également utilisé pour étudier le transport des quasiparticules dans le graphène [27]. Le potentiel de Pöschl-Teller modifié est défini par :

$$V(r) = \frac{\nu_1}{\cosh^2(\beta r)} + \frac{\nu_2}{\sinh^2(\beta r)} \quad (4.1)$$

où ν_1 et ν_2 sont des constantes. Cependant, l'équation de Schrödinger pour ce potentiel ne peut être résolue exactement que pour les ondes s (i.e, $\ell = 0$) [28]. Pour le cas $\ell \neq 0$, plusieurs techniques ont été utilisées pour obtenir des solutions approximatives. Parmi ces méthodes, celle où le terme centrifuge est approximé comme suit

$$\frac{1}{r^2} \simeq \beta^2 \left(c_0 + \frac{1}{\sinh^2(\beta r)} \right), \quad \beta > 0 \quad (4.2)$$
$$c_0 = \frac{1}{3},$$

comme montre la figure ci-dessous, cette approximation est plus significative lorsque $\beta r \ll 1$.

Dans ce chapitre, on va étudier le problème des états liés d'une particule de spin $1/2$ soumise au potentiel (4.1) et en présence de l'effet Aharonov-Bohm en adoptant l'approximation (4.2). Cependant, le terme singulier représenté par l'interaction ponctuelle spin-champ présente une anomalie due principalement au fait que l'Hamiltonien associé n'est pas auto adjoint. On est donc besoin d'une méthode de régularisation pour traiter ce problème. Là on va considérer notamment deux approches différentes : la première utilise une technique de régularisation physique ; c'est-à-dire de remplacer le terme singulier par un autre moins singulier en se basant sur des considérations physique du problème qu'on va l'appeler régularisation de Hagen [11, 12]. La deuxième approche est une analyse basée sur la méthode des extensions auto-adjointes de Bulla et Gesztesy [13].

Ainsi, dans le reste de ce chapitre on va commencer par donner un aperçu assez détaillé sur l'effet Aharonov-Bohm du point de vue théorique. Nous allons rappeler quelques propriétés importantes des potentiels électromagnétiques. Puis on va considérer cet effet sous les hypothèses de la théorie quantique standard. Puis, on va traiter le potentiel de Pöschl-Teller (4.1) à deux dimensions en présence de l'effet AB en considérant les deux méthodes de régularisation citées ci-dessus. Nous explicitement les équations transcendante des énergies relatives par les deux techniques, puis on va donner également une relation entre le paramètre arbitraire de l'extension et les paramètres du problème introduits par la régularisation physique.

4.2 Effet Aharonov-Bohm

4.2.1 Les équations de Maxwell et les transformations de jauge

Comme nous le savons, l'électrodynamique classique est une théorie physique basée principalement sur quatre équations, qui décrivent la dynamique du champ électromagnétique, appelées

équations de Maxwell

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho, \quad (4.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mathbf{j}, \quad (4.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (4.5)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0. \quad (4.6)$$

Ces équations expriment les relations entre le champ électrique \mathbf{E} et le champ magnétique \mathbf{B} et leurs sources : la densité de courant \mathbf{j} et la densité de charge ρ .

La résolution des équations de Maxwell peut être largement simplifiée en remarquant que les équations (4.5) et (4.6) sont homogènes selon les champs, i.e. ne dépendent pas des termes de sources. En effet, ces deux équations peuvent être résolues en écrivant les champs en fonction d'un potentiel scalaire ϕ et d'un potentiel vecteur \mathbf{A} de la façon suivante

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (4.7)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (4.8)$$

Les potentiels \mathbf{A} et ϕ ne définissent pas univoquement \mathbf{E} et \mathbf{B} . Cela signifie que si nous transformons les potentiels \mathbf{A} et ϕ de la manière suivante

$$\begin{cases} \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi \\ \phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \end{cases}, \quad (4.9)$$

on obtient les mêmes champs électrique et magnétique quelque soit la fonction χ . Comme on peut satisfaire les équations de Maxwell avec des potentiels différents, on dit que ces équations sont invariantes de jauge et la transformation (4.9) est généralement appelée transformation de jauge.

L'invariance de jauge des équations de Maxwell est la principale raison pour laquelle les potentiels étaient généralement considérés comme une construction purement mathématique sans aucune signification physique. Cependant, comme nous allons voir, ce point de vue a changé avec le développement de la mécanique quantique et plus précisément la découverte de l'effet Aharonov-Bohm.

4.2.2 Particule chargée dans un champ électromagnétique

La théorie quantique repose principalement sur la formulation Hamiltonienne ou Lagrangienne de la dynamique, où les champs électromagnétiques disparaissent des équations du mouvement en faveur des potentiels scalaire et vectoriel. En effet, l'Hamiltonien d'une particule de masse M et de charge q dans un champ électromagnétique est donné par

$$H = \frac{[\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)]^2}{2M} + q\phi(\mathbf{r},t). \quad (4.10)$$

Puisque le potentiel vecteur \mathbf{A} est défini seulement à une jauge près, ce qui veut dire que la fonction d'onde n'est pas invariante de jauge. Pour bien voir l'effet de cette liberté de jauge, nous considérons la transformation (4.9) pour laquelle l'équation de Schrödinger

$$H(\mathbf{A})\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \quad (4.11)$$

se transforme comme

$$H(\mathbf{A}')\psi' = i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t}. \quad (4.12)$$

Sous cette transformation, la fonction d'onde acquiert une phase supplémentaire

$$\psi' = \exp\left(i\frac{q}{\hbar c}\chi(\mathbf{r},t)\right)\psi, \quad (4.13)$$

où $\chi(\mathbf{r},t)$ est une fonction scalaire. En effet, soit une fonction d'onde, $\psi(\mathbf{r},t)$, solution de l'équation de Schrödinger décrite par l'Hamiltonien (4.10), c'est-à-dire, on a

$$\left\{ \frac{[\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)]^2}{2M} + q\phi(\mathbf{r},t) \right\} \psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}, \quad (4.14)$$

et soit $\psi'(\mathbf{r},t)$ une solution de l'équation de Schrödinger pour une transformation de jauge (4.9)

$$\left\{ \frac{[\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}'(\mathbf{r},t)]^2}{2M} + q\phi'(\mathbf{r},t) \right\} \psi'(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\psi'(\mathbf{r},t)}{\partial t}. \quad (4.15)$$

Pour trouver la relation entre les deux fonctions $\psi(\mathbf{r},t)$ et $\psi'(\mathbf{r},t)$, on pose

$$\psi'(\mathbf{r},t) = u(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t), \quad (4.16)$$

où $u(\mathbf{r},t)$ est une fonction à déterminer. Pour cela, remplaçons (4.16) dans (4.15), on obtient

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2M} \left[\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{q}{c}\mathbf{A} - \frac{q}{c}\nabla\chi \right]^2 u\psi + q\phi u\psi - \frac{q}{c} \left(\frac{\partial\chi}{\partial t} \right) u\psi \\ &= i\hbar\frac{\partial u}{\partial t}\psi + i\hbar u\frac{\partial\psi}{\partial t}. \end{aligned}$$

Le fait que ψ est une solution de (4.14), on aboutit à l'équation

$$\frac{1}{M} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \psi \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} (\nabla \chi) \right) u + \frac{1}{2M} \psi \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} (\nabla \chi) \right)^2 u = \left(i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{q}{c} u \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) \psi$$

Pour que $\psi'(\mathbf{r}, t)$ soit une solution de (4.15), il faut choisir la fonction $u(\mathbf{r}, t)$ telle que

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{q}{c} u \left(\frac{\partial \chi}{\partial t} \right) = 0, \\ \text{et } \left\{ \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} (\nabla \chi) \right\} u = 0, \end{cases}$$

la solution de ces deux équations est la fonction

$$u = \exp \left(i \frac{q}{\hbar c} \chi(\mathbf{r}, t) \right), \quad (4.17)$$

d'où le résultat (4.13). La transformation de jauge introduit donc une phase supplémentaire dans la fonction d'onde. Toutefois, étant donné que la densité de probabilité, $|\psi'|^2 = |\psi|^2$, est conservée cette dépendance de phase semble invisible.

4.2.3 L'effet Aharonov-Bohm magnétique

Considérons une particule de charge q se déplaçant le long d'un chemin, C , dans lequel le champ magnétique, \mathbf{B} , est identiquement nul. Cependant, un champ magnétique nul ne veut pas dire que le potentiel vecteur, \mathbf{A} , est aussi égale à zéro.

En traversant le chemin, la fonction d'onde de la particule va acquérir une phase, φ , qui s'écrit comme

$$\varphi = \frac{q}{\hbar c} \int_{\Gamma} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}, \quad (4.18)$$

où l'intégrale s'étend le long du chemin. Si nous considérons deux chemins séparés (Γ_1) et (Γ_2) avec les mêmes points initial et final (voir figure), la phase relative de la fonction d'onde est alors

$$\begin{aligned} \Delta\varphi &= \frac{q}{\hbar c} \int_{\Gamma_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} - \frac{q}{\hbar c} \int_{\Gamma_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \frac{q}{\hbar c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \\ &= \frac{q}{\hbar c} \int_S \mathbf{B} \cdot d^2\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

où la dernière relation découle de l'application du théorème de Stokes, et \int_S s'étend sur la surface fermée délimitée par (Γ_1) et (Γ_2).

Même si le champ est identiquement nul sur les chemins (Γ_1) et (Γ_2) , la fonction d'onde va acquérir une phase relative non nulle :

$$\begin{aligned}\Delta\varphi &= \frac{q}{\hbar c} \Phi \\ &= \frac{q}{\hbar c} \times \text{flux magnétique à travers une surface.}\end{aligned}\quad (4.20)$$

Ce phénomène, connu comme l'effet Aharonov-Bohm, conduit à des effets physique observables se traduit par le décalage de franges d'interférence.

4.3 Régularisation physique

4.3.1 Formulation du problème

Par souci de comparaison avec les résultats de la section suivante, nous allons donner, dans cette section, un résumé sur le modèle de Hagen pour le champ magnétique et le potentiel vecteur associé qu'on peut utiliser de point de vue théorique pour étudier d'une manière générale la diffusion et les états liés d'un faisceau d'électrons par un champ magnétique à la limite où le rayon de la région (solénoïde) r_0 , où ce champ est confiné, tend vers zéro tandis que le flux total Φ reste fixe (voir figure).

Le champ magnétique est supposé être perpendiculaire au plan et confiné dans un solénoïde de rayon extrêmement faible de telle sorte que le flux Φ est fini et non nul

$$\Phi = 2\pi \int_0^\infty B(r)rdr. \quad (4.21)$$

Le champ magnétique doit être pris de la forme

$$\mathbf{B}(r) = \frac{\Phi}{2\pi} \frac{\delta(r)}{r} \mathbf{e}_z, \quad (4.22)$$

le potentiel vecteur associé est donc :

$$\mathbf{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \Theta(r) \mathbf{e}_\theta, \quad (4.23)$$

où $\Theta(r)$ est la fonction de Heaviside.

Ecrivons maintenant l'équation de Pauli pour une particule non relativiste de mass M et de spin $1/2$ soumise au potentiel $V(r)$ donné (4.1) par en présence du champ AB , décrit par les expressions (4.22) et (4.23), sous la forme

$$\left[\frac{1}{2M} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 + V(r) \right] \psi = \varepsilon \psi, \quad (4.24)$$

où $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$, les σ_i ($i = 1, 2, 3$) sont les matrices de Pauli et on a pris ($\hbar = c = 1$). Le terme peut se simplifier $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2$ au moyen de la formule suivante

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + is\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}),$$

où $s = \pm 1$, (+1 pour spin haut et -1 pour spin bas). Il vient :

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 &= \boldsymbol{\pi}^2 + is\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi}) \\ &= -\nabla^2 + e^2 \mathbf{A}^2 - \frac{2e}{i} \mathbf{A} \nabla - es\sigma_z B. \end{aligned}$$

Alors, l'équation (4.24) peut s'écrire explicitement comme suit :

$$\left\{ \nabla^2 - e^2 \mathbf{A}^2 + \frac{2e}{i} \mathbf{A} \nabla - 2M [V(r) - E] + s\sigma_z eB \right\} \psi = 0, \quad (4.25)$$

Ainsi, l'équation (4.25) peut s'écrire explicitement en coordonnées polaires comme :

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} + i\alpha \Theta(r) \right]^2 - 2M [V(r) - \varepsilon] - \alpha s \sigma_z \frac{\delta(r)}{r} \right\} \psi = 0. \quad (4.26)$$

où $\psi = (\psi_1, \psi_2)^T$ et $\alpha = -e\Phi/2\pi$ et le paramètre de flux. Ecrivons maintenant la composante, ψ_1 , de la façon suivante

$$\psi_1 = f(r)e^{im\varphi}$$

il s'ensuit que $f(r)$ vérifie l'équation

$$\hat{h}f(r) = \varepsilon f(r). \quad (4.27)$$

avec

$$\hat{h} = \frac{1}{2M} \left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{[m + \alpha \Theta(r)]^2}{r^2} \right) + V(r) + \frac{\alpha s}{2M} \frac{\delta(r)}{r}. \quad (4.28)$$

4.3.2 Modèle de Hagen

L'équation (4.27) contient un terme singulier. Pour surmonter ce problème, Hagen [11, 12] a redéfini le champ magnétique (4.22) comme la limite d'un autre plus physique et moins singulier. Ce champ a la forme suivante

$$\mathbf{B}(r) = \frac{\Phi}{2\pi} \frac{\delta(r - r_0)}{r_0} \mathbf{e}_z, \quad (4.29)$$

avec

$$\mathbf{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \Theta(r - r_0) \mathbf{e}_\theta. \quad (4.30)$$

c'est-à-dire de remplacer dans (4.27) $\delta(r)/r \rightarrow \delta(r - r_0)/r_0$ et $\Theta(r) \rightarrow \Theta(r - r_0)$ avec $r_0 \ll \cdot$. Dans ce cas la partie radiale $f(r)$ vérifiée l'équation :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{(m + \alpha \Theta(r - r_0))^2}{r_0^2} - 2MV(r) + 2M\varepsilon + \alpha s \frac{\delta(r - r_0)}{r_0} \right) f(r) = 0 \quad (4.31)$$

on a deux régions :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - 2MV(r) - \frac{(m + \alpha)^2}{r^2} + 2M\varepsilon \right) f_{out}(r) = 0, \quad \text{si } r > r_0 \quad (4.32)$$

et

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - 2MV(r) - \frac{m^2}{r^2} + 2M\varepsilon \right) f_{in}(r) = 0, \quad \text{si } r < r_0 \quad (4.33)$$

Pour trouver la solution de l'équation (4.32), nous faisons le changement suivant

$$f(r) = \frac{u(r)}{\sqrt{r}}, \quad (4.34)$$

Tenir compte de (4.1) on obtient l'équation :

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\frac{1}{4} - (m + \alpha)^2}{r^2} - 2M \left(\frac{\nu_1}{\cosh^2(\beta r)} + \frac{\nu_2}{\sinh^2(\beta r)} \right) + 2M\varepsilon \right\} u(r) = 0. \quad (4.35)$$

Cette équation ne peut être résolue analytiquement à cause du terme centrifuge. Par conséquent, nous réécrivons cette équation en utilisant l'approximation donnée par (4.2). Ainsi, (4.35) devient

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \beta^2 \left(c_0 + \frac{1}{\sinh^2(\beta r)} \right) \left(\frac{1}{4} - (m + \alpha)^2 \right) - 2M \left(-\nu_1 \frac{1}{\cosh^2(\beta r)} + \nu_2 \frac{1}{\sinh^2(\beta r)} \right) + 2M\varepsilon \right\} u(r) = 0 \quad (4.36)$$

considérons le changement de variable

$$\rho = \cosh^2(\beta r)$$

$$1 \leq \rho < \infty$$

et calculons explicitement les dérivées

$$\begin{aligned} \frac{du}{dr} &= \beta \sinh(2\beta r) \frac{du}{d\rho} \\ \frac{d^2u}{dr^2} &= 2\beta^2 \cosh 2\beta r \frac{du}{d\rho} + \beta^2 \sinh^2(2\beta r) \frac{d^2u}{d\rho^2} \\ &= 2\beta^2 (2\rho - 1) \frac{du}{d\rho} + 4\beta^2 \rho (\rho - 1) \frac{d^2u}{d\rho^2} \end{aligned}$$

on peut alors réécrire l'équation (4.36) comme

$$\rho(1 - \rho) \frac{d^2u}{d\rho^2} + \left(\frac{1}{2} - \rho\right) \frac{du}{d\rho} + \left(\frac{\xi}{1 - \rho} + \frac{\delta}{\rho} + \kappa^2\right) u = 0, \quad (4.37)$$

où

$$\xi = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{4} - (m + \alpha)^2 \right) - \frac{M\nu_2}{2\beta^2} \quad (4.38)$$

$$\delta = \frac{M\nu_1}{2\beta^2} \quad (4.39)$$

$$\kappa^2 = -\frac{1}{4} c_0 \left(\frac{1}{4} - (m + \alpha)^2 \right) - \frac{M\varepsilon}{2\beta^2} \quad (4.40)$$

A ce stade, nous considérons la transformation suivante :

$$u = (1 - \rho)^\mu \rho^\lambda g$$

où λ et μ sont des constantes arbitraires. Calculons alors les dérivées

$$\begin{aligned} \frac{du}{d\rho} &= -\mu(1 - \rho)^{\mu-1} \rho^\lambda g + \lambda(1 - \rho)^\mu \rho^{\lambda-1} g + (1 - \rho)^\mu \rho^\lambda \frac{dg}{d\rho} \\ \frac{d^2u}{d\rho^2} &= \mu(\mu - 1)(1 - \rho)^{\mu-2} \rho^\lambda g - \lambda\mu(1 - \rho)^{\mu-1} \rho^{\lambda-1} g - \mu(1 - \rho)^{\mu-1} \rho^\lambda \frac{dg}{d\rho} \\ &\quad - \lambda\mu(1 - \rho)^{\mu-1} \rho^{\lambda-1} g + \lambda(\lambda - 1)(1 - \rho)^\mu \rho^{\lambda-2} g + \lambda(1 - \rho)^\mu \rho^{\lambda-1} \frac{dg}{d\rho} \\ &\quad - \mu(1 - \rho)^{\mu-1} \rho^\lambda \frac{dg}{d\rho} + \lambda(1 - \rho)^\mu \rho^{\lambda-1} \frac{dg}{d\rho} + (1 - \rho)^\mu \rho^\lambda \frac{d^2g}{d\rho^2} \end{aligned}$$

Par conséquent, (4.37) devient :

$$\begin{aligned} \rho(1-\rho) \frac{d^2g}{d\rho^2} + \left[(-2\lambda - 2\mu - 1)\rho + \left(2\lambda + \frac{1}{2} \right) \right] \frac{dg}{d\rho} \\ + \frac{1}{\rho} \left(\lambda^2 + \delta - \frac{\lambda}{2} - \lambda^2\rho \right) g \\ + \frac{1}{(1-\rho)} \left(\mu^2\rho - \frac{\mu}{2} + \xi \right) g + (\kappa^2 - 2\lambda\mu) g = 0 \end{aligned} \quad (4.41)$$

Choisissons les paramètres λ et μ de façon qu'ils vérifient les deux équations suivantes

$$\begin{aligned} \lambda^2 - \frac{\lambda}{2} + \delta &= 0 \\ \mu^2 - \frac{\mu}{2} + \xi &= 0, \end{aligned} \quad (4.42)$$

L'équation (4.41) se réduit à

$$\rho(1-\rho) \frac{d^2g}{d\rho^2} + \left\{ \left(2\lambda + \frac{1}{2} \right) - [2(\lambda + \mu) + 1]\rho \right\} \frac{dg}{d\rho} - [(\mu + \lambda)^2 - \kappa^2] g = 0 \quad (4.43)$$

où λ et μ sont explicitement données par les expressions

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= \frac{1}{4} \pm \frac{1}{4} \sqrt{1 - 16\delta} \\ \mu_{\pm} &= \frac{1}{4} \pm \frac{1}{4} \sqrt{1 - 16\xi} \end{aligned} \quad (4.44)$$

Notons ici qu'il y a quatre choix possibles concernant les couples $(\lambda_{\pm}, \mu_{\pm})$, conduisant à la même solution de l'équation précédente. On choisit l'ensemble (λ_+, μ_+) . Ainsi l'équation précédente s'écrit simplement comme suit :

$$\rho(1-\rho) \frac{d^2g}{d\rho^2} + \left\{ \left(2\lambda + \frac{1}{2} \right) - [2(\lambda + \mu) + 1]\rho \right\} \frac{dg}{d\rho} - [(\mu + \lambda)^2 - \kappa^2] g = 0 \quad (4.45)$$

maintenant considérons le changement de variable

$$z = 1 - \rho$$

on obtient ainsi une équation de type hepergéométrique de Gauss de la forme

$$z(1-z) \frac{d^2g}{dz^2} + \left\{ 2\mu + \frac{1}{2} - (2\lambda + 2\mu + 1)z \right\} \frac{dg}{dz} - [(\mu + \lambda)^2 - \kappa^2] g = 0 \quad (4.46)$$

où la solution générale au voisinage de $z = 0$ (i.e, $r = 0$) est donnée par la combinaison :

$$g(z) = A F(a, b, c, z) + B z^{1-c} F(1 + a - c, 1 + b - c, 2 - c, z) \quad (4.47)$$

où A et B sont des constantes arbitraires et les abréviations a , b et c sont :

$$a = \lambda + \mu + \kappa$$

$$b = \lambda + \mu - \kappa$$

$$c = 2\mu + \frac{1}{2}$$

En regroupant les résultats ci-dessus, la partie radiale $f(r)$ pour la région $r > r_0$ est :

$$f_{out}(r) = \frac{A}{\sqrt{r}} [\sinh(\beta r)]^{2\mu} [\cosh(\beta r)]^{2\lambda} F(a, b, c, -\sinh^2(\beta r)) \quad (4.48)$$

$$+ \frac{B}{\sqrt{r}} [\sinh(\beta r)]^{-2\mu+1} (\cosh(\beta r))^{2\lambda} F(1+a-c, 1+b-c, 2-c, -\sinh^2(\beta r)).$$

et pour la région $r < r_0$ est :

$$f_{in}(r) = \frac{C}{\sqrt{r}} [\sinh(\beta r)]^{2\mu_0} (\cosh(\beta r))^{2\lambda_0} F(a_0, b_0, c_0, -\sinh^2(\beta r)). \quad (4.49)$$

où C est une constante arbitraire et $a_0 = a(\alpha = 0)$, $c_0 = c(\alpha = 0)$, $\mu_0 = \mu(\alpha = 0)$ et $\lambda_0 = \lambda(\alpha = 0)$

A fin de déterminer le rapport B/A , appliquons les conditions de raccordement suivante :

$$\begin{cases} f_{in}(r_0 - \varepsilon) = f_{out}(r_0 + \varepsilon) \\ \left[\frac{df(r)}{dr} \right]_{r_0 - \varepsilon}^{r_0 + \varepsilon} = \frac{\alpha s}{r} f(r) \end{cases}$$

la première condition donne, pour l'ordre le plus bas en r_0 , le résultat suivant :

$$A(\beta)^{2\mu} r_0^\sigma + B(\beta)^{1/2-2\mu} r_0^{-\sigma} = C(\beta)^{2\mu_0} r_0^{\sigma_0} \quad (4.50)$$

avec $\sigma = 2\mu - \frac{1}{2}$ et $\sigma_0 = 2\mu_0 - \frac{1}{2}$.

La deuxième condition donne

$$A\sigma(\beta)^{2\mu} r_0^{\sigma-1} - B\sigma(\beta)^{1/2-2\mu} r_0^{-\sigma-1} - C\sigma_0(\beta)^{2\mu_0} r_0^{\sigma_0-1} = \frac{\alpha s}{r_0} C(\beta)^{2\mu_0} r_0^{\sigma_0} \quad (4.51)$$

de l'équation (4.50) on a :

$$(\beta)^{2\mu} r_0^\sigma + \frac{B}{A} (\beta)^{1/2-2\mu} r_0^{-\sigma} = \frac{C}{A} (\beta)^{2\mu_0} r_0^{\sigma_0} \quad (4.52)$$

et de l'équation(4.51) on a :

$$\sigma(\beta)^{2\mu} r_0^{\sigma-1} - \frac{B}{A} \sigma(\beta)^{1/2-2\mu} r_0^{-\sigma-1} = \frac{C}{A} (\alpha s + \sigma_0) (\beta)^{2\mu_0} r_0^{\sigma_0-1} \quad (4.53)$$

remplaçons (4.52) dans (4.53), il vient

$$\frac{B}{A} (\sigma + \sigma_0 + \alpha s) (\beta)^{1/2-2\mu} r_0^{-\sigma} = -(\alpha s + \sigma_0 - \sigma) (\beta)^{2\mu} r_0^{\sigma}$$

on obtient ainsi le rapport B/A :

$$\frac{B}{A} = -\frac{(\alpha s + \sigma_0 - \sigma)}{(\sigma + \sigma_0 + \alpha s)} \beta^{4\mu - \frac{1}{2}} r_0^{2\sigma} \quad (4.54)$$

explicitement ce rapport est :

$$\frac{B}{A} = -\frac{(\alpha s + 2\mu_0 - 2\mu)}{(2\mu + 2\mu_0 - 1 + \alpha s)} \beta^{4\mu - \frac{1}{2}} r_0^{4\mu - 1} \quad (4.55)$$

Le rapport $\frac{B}{A} \rightarrow 0$ lorsque $r_0 \rightarrow 0$ sauf si :

$$2\mu + 2\mu_0 - 1 + \alpha s = 0 \quad (4.56)$$

c'est-à-dire

$$\sqrt{(m + \alpha)^2 + \frac{2M}{\beta^2} \nu_2} + \sqrt{m^2 + \frac{2M}{\beta^2} \nu_2} + \alpha s = 0$$

et l'ordre le plus bas en r_0 exige aussi que :

$$\sigma < \frac{1}{2} \quad (4.57)$$

Dans ce cas, c'est-à-dire lorsque les deux conditions (4.56) et (4.57) sont simultanément satisfaites, la partie singulière de la solution (4.48) domine et par conséquent devient physiquement acceptable. Autrement dit :

$$f(r) \rightarrow \frac{B}{\sqrt{r}} [\sinh(\beta r)]^{-2\mu+1} (\cosh(\beta r))^{2\lambda} F(1+a-c, 1+b-c, 2-c, -\sinh^2(\beta r)). \quad (4.58)$$

Cherchons maintenant le rapport B/A lorsque $r \rightarrow \infty$. Pour ce but, utilisons la propriété de la fonction hypergéométrique de Gauss suivante [24]

$$F(a, b, c; z) = (1-z)^{-a} F\left(a, c-b, c; \frac{z}{z-1}\right) \quad (4.59)$$

remplaçons la relation (4.59) dans l'équation (4.48)

$$f_{out}(r) = \frac{A}{\sqrt{r}} [\sinh(\beta r)]^{2\mu} (\cosh^{2\lambda-2a}(\beta r)) F(a, c-b, c, \tanh^2(\beta r)) \\ + \frac{B}{\sqrt{r}} [\sinh(\beta r)]^{-2\mu+1} (\cosh^{-2(a-c-\lambda+1)}(\beta r)) F(1+a-c, 2-c-\lambda, 2-c, \tanh^2(\beta r))$$



On considère que la fonction $f_{out}(r) \rightarrow 0$ lorsque $r \rightarrow +\infty$ pour les états liés. Comme $\tanh^2(\beta r) \rightarrow 1$ lorsque $r \rightarrow \infty$, dans ce cas, on utilise la formule [24]

$$F(\alpha, \beta, \gamma, 1) = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha)\Gamma(\gamma - \beta)} \quad (4.61)$$

et notons que (voir les abréviations ci-dessus)

$$\begin{aligned} 2\lambda - 2a &= -2\mu - 2\kappa \\ -2(a - c - \lambda + 1) &= 2\mu - 1 - 2\kappa \end{aligned}$$

par suite (4.60) donne

$$A \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(c-a)\Gamma(b)} + B \frac{\Gamma(2-c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(1-a)\Gamma(b-c+1)} = 0$$

c'est-à-dire on obtient le rapport

$$\frac{B}{A} = - \frac{\Gamma(c)\Gamma(1-a)\Gamma(b-c+1)}{\Gamma(c-a)\Gamma(b)\Gamma(2-c)} \quad (4.62)$$

ou bien

$$\frac{B}{A} = (\lambda + \mu + \kappa) \frac{\Gamma(2\mu + \frac{1}{2})\Gamma(-\lambda - \mu - \kappa)\Gamma(\lambda - \kappa - \mu + \frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{3}{2} - 2\mu)\Gamma(\lambda - \kappa + \mu)\Gamma(\mu - \lambda - \kappa + \frac{1}{2})} \quad (4.63)$$

égalons les deux résultats (4.54) et (4.63), on obtient une équation transcendente d'énergie suivante :

$$\frac{(\alpha s + 2\mu_0 - 2\mu)}{(2\mu + 2\mu_0 - 1 + \alpha s)} \beta^{4\mu - \frac{1}{2}} r_0^{2\sigma} = (\lambda + \mu + \kappa) \frac{\Gamma(2\mu + \frac{1}{2})\Gamma(-\lambda - \mu - \kappa)\Gamma(\lambda - \kappa - \mu + \frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{3}{2} - 2\mu)\Gamma(\lambda - \kappa + \mu)\Gamma(\mu - \kappa - \lambda + \frac{1}{2})} \quad (4.64)$$

cas spéciaux :

i) Dans le cas limite $r_0 \rightarrow 0$ et $2\mu + 2\mu_0 - 1 + \alpha s \neq 0$, l'égalité dans (4.64) est compensée par les pôles de la fonction gamma au dénominateur :

$$\lambda + \mu - \kappa = -n \quad (4.65)$$

ou bien

$$\kappa^2 = (n + \lambda + \mu)^2 \quad (4.66)$$

ainsi on obtient le spectre relatif aux états réguliers :

$$\varepsilon_{n,m} = -\frac{2\beta^2}{M} (n + \lambda + \mu)^2 - \frac{1}{2M} \beta^2 c_0 \left(\frac{1}{4} - (m + \alpha)^2 \right) \quad (4.67)$$

ii) Si maintenant on a $r_0 \rightarrow 0$ et $(2\mu + 2\mu_0 - 1 + \alpha s) = 0$, le premier membre de (4.64) diverge. Cette divergence est compensée par les pôles de la fonctions gamma au numérateur

$$-\lambda - \mu - \kappa = -n$$

ou bien

$$\kappa^2 = (n - \lambda - \mu)^2$$

et on obtient le spectre d'énergie relatif aux états singuliers :

$$\varepsilon_{n,m} = -\frac{2\beta^2}{M} (n - \lambda - \mu)^2 - \frac{1}{2M} \beta^2 c_0 \left(\frac{1}{4} - (m + \alpha)^2 \right) \quad (4.68)$$

4.4 L'approche des extensions auto-adjointes

Pour des fonctions d'onde radiale lisses ou infiniment dérivables dans $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^+ / \{0\}, r dr)$ et qui s'annulent au voisinage de $r = 0$. Il est donc raisonnable d'interpréter l'Hamiltonien (4.28) comme une extension auto-adjointe de \hat{h}_0 tels que

$$\hat{h}_0 = \frac{1}{2M} \left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{(m + \alpha)^2}{r^2} \right) + V(r) \quad (4.69)$$

Il est bien connu pour $V(r) = 0$ [29] que l'opérateur symétriques \hat{h}_0 est essentiellement auto-adjoint pour $|m + \alpha| \geq 1/2$ et le spectre correspondant est continu. Alors que pour $|m + \alpha| < 1/2$, il admet une famille d'extensions auto-adjointes à un paramètre. Notons ici qu'il a été montré dans la référence [13], par plus de rigueur mathématique, que les extensions auto-adjointes de (4.69) pour un potentiel régulier $V(r)$ amènent toujours à la même condition au limite à l'origine donnée par :

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^{2\mu-1/2} f(r) = \lambda \lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{r^{2\mu-1/2}} \left\{ f(r) - \left(\lim_{r' \rightarrow 0} r'^{(2\mu-1/2)} f(r') \right) \frac{1}{r^{2\mu-1/2}} \right\}. \quad (4.70)$$

où λ est un paramètre mathématique arbitraire dite de l'extension et $f(r)$ est la solution de l'équation au valeurs propres suivante :

$$\hat{h}_0 f(r) = \varepsilon f(r), \quad (4.71)$$

Comme on vu, la solution $f(r)$ de (4.71) est

$$f(r) = \frac{A}{\sqrt{r}} [\sinh(\beta r)]^{2\mu} [\cosh(\beta r)]^{2\lambda} F(a, b, c, -\sinh^2(\beta r)) \quad (4.72)$$

$$+ \frac{B}{\sqrt{r}} [\sinh(\beta r)]^{-2\mu+1} (\cosh(\beta r))^{2\lambda} F(1+a-c, 1+b-c, 2-c, -\sinh^2(\beta r))$$

Cette solution se comporte à l'origine comme suit :

$$f(r) \sim A(\beta)^{2\mu} r^{2\mu-1/2} + B(\beta)^{1/2-2\mu} r^{1/2-2\mu} \quad (4.73)$$

remplaçons dans (4.70), il vient

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^{2\mu-1/2} \left(A(\beta)^{2\mu} r^{2\mu-1/2} + B(\beta)^{1/2-2\mu} r^{1/2-2\mu} \right)$$

$$= \lambda \lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{r^{2\mu-1/2}} \left\{ A(\beta)^{2\mu} r^{2\mu-1/2} + B(\beta)^{1/2-2\mu} r^{1/2-2\mu} \right.$$

$$\left. - \left(\lim_{r' \rightarrow 0} (r')^{2\mu-1/2} \left(A(\beta)^{2\mu} (r')^{2\mu-1/2} + B(\beta)^{1/2-2\mu} (r')^{1/2-2\mu} \right) \right) \frac{1}{r^{2\mu-1/2}} \right\}$$

qui se simplifier à

$$B(\beta)^{1/2-2\mu} = \lambda \lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{r^{2\mu-1/2}} \left(A(\beta)^{2\mu} r^{2\mu-1/2} \right) \quad (4.74)$$

et on arrive au rapport :

$$\frac{B}{A} = \lambda \beta^{4\mu-1/2} \quad (4.75)$$

Egalons les deux rapports (4.75) et (4.63) on obtient l'équation transcendante de l'énergie dépendant d'un paramètre arbitraire λ comme suit :

$$\lambda \beta^{4\mu-1/2} = (\lambda + \mu + \kappa) \frac{\Gamma(2\mu + \frac{1}{2}) \Gamma(-\lambda - \kappa - \mu) \Gamma(\lambda - \kappa - \mu + \frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{3}{2} - 2\mu) \Gamma(\lambda - \kappa + \mu) \Gamma(\mu - \lambda - \kappa + \frac{1}{2})} \quad (4.76)$$

Comme λ est un paramètre libre, on peut trouver quelques cas particuliers comme dans la régularisation précédente en considérant les limites $\lambda \rightarrow 0$ et $\lambda \rightarrow \infty$.

En fin, notons qu'on peut fixer le paramètre λ si on compare le résultat (4.64) de la régularisation suivant le modèle de Hagen et (4.76) des extensions auto-adjointes, on obtient ainsi la relation :

$$\frac{(\alpha s + 2\mu_0 - 2\mu)}{(2\mu + 2\mu_0 - 1 + \alpha s)} \beta^{4\mu-1/2} r_0^{2\sigma} = \lambda \beta^{4\mu-1/2}$$

c'est-à-dire

$$\lambda = \frac{(\alpha s + 2\mu_0 - 2\mu)}{(2\mu + 2\mu_0 - 1 + \alpha s)} r_0^{2\sigma}$$

Chapitre 5

Conclusion générale

Dans ce mémoire, nous on a donné en premier lieu le spectre d'énergie du potentiel de Morse à une dimension perturbé par des interactions ponctuelles sous forme d'équation transcendante au moyen de fonctions de Green. Puis, on considéré le potentiel de Pöschl-Teller à deux dimensions perturbé par l'effet Aharonov-Bohm qui est un problème présentant une anomalie. Par conséquent, on a utilisé deux méthodes de régularisations ; la première est une régularisation physique basée sur une rédefinition du terme singulier représenté par une interaction ponctuelle et la deuxième est la technique des extensions auto-adjointes de Bulla et Gesztesy [13]. On a réussi à obtenir une relation entre le paramètre arbitraire de l'extension et les paramètres du problème introduits par la régularisation physique.

Bibliographie

- [1] R. de L. Kronig and W. G. Penney, Proc. Roy. Soc. (London) **130 A**, 499-513 (1931).
- [2] H. Bethe and R. Peierls, Proc. Roy. Soc. (London) **148 A**, 146-156 (1935).
- [3] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, (Springer-Verlag, Berlin, 1979).
- [4] Heisenberg, Ann. d. Phys. **32**, 20 (1938).
- [5] B. R. Holstein, Am. J. Phys. **82**, 591 (2014),
- [6] R. M. Cavalcanti, Rev. Bras. Ens. Fis. **21**, 336 (1999).
- [7] G.'t Hooft and M. Veltman, Nucl. Phys. **B 44**, 189 (1972).
- [8] N. Ferkous, Phys. Rev. A **88**, 064101 (2013).
- [9] D .M. Gitman, I.V. Tyutin and B. L. Voronov, "*Self-adjoint extensions in Quantum Mechanics*" (Springer Science + Business Media, New York, 2012).
- [10] Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
- [11] C. R. Hagen, Phys. Rev. Lett. **64**, 503 (1990).
- [12] C. R. Hagen, Int. J. Mod. Phys. **A 6**, 3119 (1991).
- [13] W. Bulla and F. Gesztesy, J. Math. Phys. **26**, 2520 (1985).
- [14] F. M. Andrade, E. O. Silva, M. Pereira, Annals of Physics **339**, 510 (2013).
- [15] D. A. Atkinson and H. W. Crater, Am. J. Phys. **43**, 301(1975).
- [16] V. S. Araujo, F.A.B. Coutinho and J. F. Perez, Am. J. Phys. **72**, 203-213 (2003).
- [17] G. Bonneau, J. Faraut and G. Valent, Am. J. Phys. **69**, 322-331(2001).
- [18] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, 10 printing, (U.S. Government Printing Office, Washington, D.C., 1972), pp. 687-689.

- [19] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, and H. Holden, "*Solvable Models in Quantum Mechanics*", 2nd ed. (AMS Chelsea Publishing, Providence, RI, 2004).
- [20] P. M. Morse, Phys. Rev. **34**, 57 (1929).
- [21] R. Mahlanen, J. P. Jalkanen, and T. A. Pakkanen, Chem. Phys. **313**, 271 (2005).
- [22] H. Erkol, E. Demiralp, Mol. Phys. **107** (2009) 2053.
- [23] A.P.Prudnikov, Yu. A. Brychkov and O.I. Marichev, *Special functions*, Vol. 2, Translated from the Russian by N. M. Gueen, Gordon and Breach Science Publishers, New York(1998).
- [24] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, (Elsevier Inc. 2007).
- [25] G. Poschl and E. Teller, Z. Physik 83, 143 (1933); W. Lotmar Z. Physik **93**, 528 (1935).
- [26] A. R. Römer and B. Sutherland, Phys. Rev. **B 49**, 6779 (1994).
- [27] C. S. Park, Phys. Rev. **B 92**. 165422 (2015).
- [28] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, 2nd Ed., Springer, Berlin, 1994, p. 107, vol. I.
- [29] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics. II. Fourier Analysis, Self-Adjointness*. (Academic Press, ²New York - London, 1975).

