

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**  
**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR**  
**ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA**

**FACULTE DES SCIENCES**

**DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**



# **MEMOIRE**

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

## **MASTER**

**Spécialité : PHYSIQUE**

**Option : physique computationnelle**

Par

**Gouasmia ZAHRA**

Sur le thème

# **ETUDE DU DEUTERIUM**

<b>Mr. Lasri BOUMEDIENE</b>	<b>Pr</b>	<b>Université Dr. Tahar Moulay de Saida</b>	<b>Président</b>
<b>Mr. Kouidri SMAIL</b>	<b>MC</b>	<b>Université Dr. Tahar Moulay de Saida</b>	<b>Encadreur</b>
<b>Mme. Benhalima NADIA</b>	<b>MC</b>	<b>Université Dr. Tahar Moulay de Saida</b>	<b>Examinatrice</b>

**Année Universitaire 2020 - 2021**

أَعُوذُ بِاللَّهِ مِنَ الشَّيْطَانِ الرَّجِيمِ بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

أَلْحَمْدُ لِلَّهِ رَبِّ الْعَالَمِينَ ②  
الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ ③ مَلِكِ يَوْمِ الدِّينِ ④  
إِيَّاكَ نَعْبُدُ وَإِيَّاكَ نَسْتَعِينُ ⑤  
أَهْدِنَا الصِّرَاطَ الْمُسْتَقِيمَ ⑥  
صِرَاطَ الَّذِينَ أَنْعَمْتَ عَلَيْهِمْ  
غَيْرِ الْمَغْضُوبِ عَلَيْهِمْ وَلَا الضَّالِّينَ ⑦

سُورَةُ الْفَاتِحَةِ

## *Dédicace*

Je dédie se modeste travail

### **A ma chère mère**

Aucune dédicace ne saurait être assez éloquente pour exprimer ce que tu mérites pour tous les sacrifices que tu n'as cessé de me donner de puis ma naissance, Je te dédie se travail en témoignage de mon profond amour. J'aurais tant aimé que vous soyez présents .que dieu ait vos âmes dans sa sainte miséricorde

### **A mon père**

Pour son amour, sa patience, ses considérables sacrifices pour me parvenir à ce niveau

### **A mon oncle**

GOUASMIA HAWARI

### **A mes frères ;**

MOHAMED, ABD EL WAHID, YUCEF

### **A mes sœurs;**

AMRIA, HADJA, HADJER, MERIEM WAFAA

### **A ma famille :**

Gouasmia MANSOR, Ferhi MORAD, Zoughmani NOUREDDINE, Raachi KAMEL, Ferhi CHIKH, Ferhi MOHAMED RAYAN, Ferhi MOHAMED ISLEM, Zoughmani YACINE

### **A tous ceux que j'aime :**

Larbi ABD ELMADJID, Briki KHADIDJA, Fidah ASMA, Berni REKIA, Ouhala NARDJIS, Drici WAFAA, Bouzarwata Meriem, Halimi NABIL , Benyahia KADA , Halimi NAFISSA, Idris Khodja KHEIRA, Arabi AMINE.

### **A tous mes amies sans exceptions ;**

Et tous les professeurs et les étudiants de physique computationnelle.

## *Remerciements :*

*Je tiens d'abord à remercier dieu le plus puissant qui m'a donné la volonté, le courage, et m'a porté l'aide pour la réalisation de ce modeste travail de recherche.*

*Je tiens à exprimer ma gratitude à mon encadreur de recherche*

*MONSIEUR. KUDRI SMAIL*

*Qui accepté de suivre ce travail je la remercie également pour ses conseils précieux et ses encouragements.*

*Mes remerciements vont aussi aux membres du jury qui ont accepté d'évaluer ce travail :*

*Mme. BEN HLI MANADIA*

*M. LASRI BOUMEDIENNE*

*Un grand merci à l'enseignant qui m'aide Monsieur MOHAMED BEN TOUOCH*

*Et mon chère amie*

*ABDERRAHMEN MOHAMED AZZEDINE*

# SOMMAIRE

<b>Introduction générale</b>	<b>7</b>
<b>Chapitre I La mécanique quantique selon Schrödinger</b>	<b>9</b>
I.1. Introduction	10
I.2. Expérience de Young	12
I.3. Effet photoélectrique	15
I.4. Modèle de Bohr	17
I.5. Construction de l'équation de Schrödinger	17
I.6. Le flux de probabilité	19
I.7. L'équation de Schrödinger dépendante du temps	20
I.8. Conclusion	21
Référence	22
<b>Chapitre II : L'équation de Schrödinger dans un potentiel constant</b>	<b>23</b>
II.1. Introduction	24
II.1. L'origine de l'équation de Schrödinger	24
II.3. Les solutions de l'équation de Schrödinger	26
3.1. Barrière de potentiel	
3.2. Puits de potentiel	
II.4. Conclusion	27
Référence	28
<b>Chapitre III : Numérique de l'équation de Schrödinger pour une potentielle constante application au deutérium</b>	<b>29</b>
III.1. Introduction	30
III.2. Méthode des différences finies	31

III.3 Application au deutérium	31
III.3.a présentation de notre élément chimique	31
III.3.b calcul de l'énergie liaison	31
III.3.c présentation au deutérium	33
III.4 organigramme de calcul	33
III.5 Résultats et discussions	36
III.6 Conclusion	43
Référence	44
Conclusion général	45
Résumé	46

## Introduction générale

Ce mémoire entre dans le cadre de la préparation d'un diplôme de master en physique computationnelle.

Ou j'ai achevé mon travail au département de physique avec mon ami étudiant aussi en master physique computationnelle en phase finale.

La physique quantique a apporté une révolution conceptuelle ayant des répercussions jusqu'en philosophie (remise en cause du déterminisme) et en littérature (science-fiction). Elle a plusieurs applications technologiques notamment: en énergie nucléaire, imagerie médicale par résonance magnétique nucléaire, diode, transistor, circuit intégré, microscope électronique et laser. Un siècle après sa conception, elle est abondamment utilisée dans la recherche en physique quantique, théorie quantique des champs, physique de la matière condensée, physique nucléaire, physique des particules, physique statistique quantique, astrophysique, gravité quantique), et physique mathématique et plus particulièrement en informatique (ordinateur quantique, cryptographie quantique). Elle est considérée avec la relativité générale d'Einstein les deux piliers des deux théories majeures du XXe siècle. [1]

Elle est connue pour être contre-intuitive et nécessiter un formalisme mathématique donne par Feynman, l'un des plus grands théoriciens spécialistes de la physique quantique de la seconde moitié du XXe siècle via son proverbe : « Je crois pouvoir affirmer que personne ne comprend vraiment la physique quantique. »

La raison principale de ces difficultés est que le monde quantique se restreint à l'infiniment petit mais pouvant avoir des applications à plus grande échelle car il se comporte très différemment de l'environnement macroscopique auquel nous vivons.

Et l'un des plus grandes différences fondamentales qui séparent ces deux mondes sont par exemple : la quantification ou un certain nombre d'observables, par exemple l'énergie émise par un atome lors d'une transition entre états excités, sont quantifiées, c'est-à-dire qu'elles ne peuvent prendre leur valeur que dans un ensemble discret de résultats et que la mesure de sa valeur propre nous donne la réalité de la physique c'est le cas de l'oscillateur harmonique.

Ce qui est non confirmée par la mécanique classique qui prédit le plus souvent que ces observables peuvent prendre continûment n'importe quelle valeur d'ou la dualité onde-corpuscule ajuste par Louis de Broglie en 1927 et la notion de la fonction d'onde de la particule (ou corpuscule), prend sa position en mécanique quantique et remplace la définition de la trajectoire via sa probabilité de présence qui n'est autre que le module au carrée de cette fameuse fonction.

En particulier, l'expérience de l'effet photoélectrique qui prouve que la lumière peut se comporter comme des particules (photons) ou comme une onde (rayonnement produisant des interférences) selon le l'expérience des fentes de Young.

Les électrons et autres particules peuvent également se comporter comme des ondes et le principe de l'indétermination de Heisenberg : prend effet.

On ne peut pas localiser les électrons ainsi que leurs vitesse qu'a une indétermination fondamentale d'ou le principe d'incertitude de Heisenberg.

$$\Delta x \Delta p = \hbar [2]$$

C'est à dire qu'il est impossible d'obtenir une grande précision sur la mesure de la vitesse d'une particule sans obtenir une précision médiocre sur sa position, et vice versa.

Alors il nous faut une équation qui régit toute la physique non relativiste d'ou l'équation de Schrödinger.

Bien que cette fameuse équation le temps et l'espace n'interviennent pas de la même manière le terme est linéaire alors que celui de l'espace est quadratique.

En effet pour trouver la forme mathématique de cette l'équation; Schrödinger a utilisé l'équation relativiste de Klein Gordon et sa projection sur l'atome d'hydrogène ne donne pas de résultat en accord avec l'expérience car cette dernière équation traduit les termes temps et espace sous forme quadratique.



## Référence :

1. Brian Clegg, Le Courrier du Livre, 2015 Bruce Colin,
2. Les Lapins de M. Schrödinger, 2006 Alain Connes,
3. Jean Hladik, 2008, 320 p. (ISBN 978-2-7298-3738-9).
4. Étienne Klein, collection Champs n°557, 2004
  
5. Stéphane Deligeorges (ed), Le Monde quantique, Le Seuil, collection Point-Science n°46, 1984 (ISBN 2-02-008908-4)
6. Bernard d'Espagnat, n°26, 1981 (ISBN 2-02-005417-5)
  
7. Michel Le Bellac, Physique quantique, CNRS édition. Eyvind H. Wichmann (Author), Quantum Physics (Berkeley Physics Course, Volume
  
8. Jagdish Mehra & Helmut Rechenberg, The Historical Development of Quantum Theory, Springer-Verlag (1982-2002), (ISBN 0-387-95262-4)
9. The Mathematical Foundations of Quantum Mechanics », éd. Jacques Gabay, 1992, (ISBN 978-2-87647-047-7)
10. Thierry Lombry, , 2005 Dunod, 2004 Gordon Kane, Supersymétrie, Sciences, 1995 Forum mégascience de l'OCDE, Physique des particules, OCDE, 1995
11. Bernard d'Espagnat, Le Réel voilé, analyse des concepts quantiques, Fayard, 1994 Sven Ortolí et J.-M. Pelhate, Aventure quantique, Belin, 1993 Paul Davies, La nouvelle physique, Sciences Flammarion, 1993 Jean-Pierre Pharabod et B. Pire, Le rêve des physiciens, Odile Jacob, 1993

**Chapitre I**  
**La mécanique**  
**quantique**  
**selon**  
**Schrodinger**

## I.1 Introduction :

**N**ous nous intéressons dans ce chapitre de vous donner une vision sur l'apport de la mécanique quantique et comment a été interprété par equation de Schrodinger ?. Pour cela essayons de citer quelque phénomènes qui ont été réalisés expérimentalement et ont été mal interprétés par la mécanique classique, l'électromagnétique et la thermodynamique. Le phénomène commun était la lumière. La lumière a deux aspects un aspect ondulatoire interprété par Young expérimentalement et analysé par Maxwell selon le caractère ondulatoire d'où les ondes électromagnétiques.

Le deuxième aspect était corpusculaire et la fameuse expérience qui bouleverse toute la physique vient de cela c'est l'effet photoélectrique.

Et vient l'année célèbre 1905 ou A. Einstein suite à ces travaux de recherche justifiant le concept des photons et la célèbre interprétation de l'effet photoélectrique en assimilant son modèle par analogie avec la distribution des molécules dans un gaz discret [1].

Ces travaux ont permis aussi à l'explication du rayonnement des corps noirs et le concept quantique commence à se dérouler. Cette démarche a mené les physiciens pas à pas dans un monde étrange durant toute une décennie de 1905 à 1913 et le phénomène des transitions électroniques entre les orbites prend axe dans ce domaine.

Après 10 ans plus tard L. De Broglie a donné une interprétation plus profonde aux orbites de Bohr en suggérant même que les électrons sont aussi des ondes et la condition de quantification revient à dire qu'il y a un nombre entier de  $\lambda$  qui est présent dans le cercle. Nous en donnerons ici l'origine de la fameuse équation dite Equation de Schrodinger [2].

En se basant sur les idées de Louis de Broglie via la mécanique ondulatoire E. Schrodinger expose dans un séminaire un thème qui porte sur : " Qu'est-ce que c'est que cette onde de Louis De Broglie qui n'a pas d'équation ? " et les plus grands physiciens cherchent à comprendre l'origine de cette mystérieuse onde puis ils cherchent à les résoudre.

A la suite de ce séminaire, Schrödinger trouve en 1925 une équation pour les ondes de Louis de Broglie en se référant sur la nature de l'équation des ondes électromagnétiques donnée par Maxwell.

Erwin Schrödinger (1887-1961), physicien autrichien, professeur aux universités de Berlin,

Oxford et à l'Institute of Advanced Studies de Dublin. Il pose les bases de la mécanique quantique en postulant l'équation qui porte son nom. En 1944, il publie Qu'est-ce que la vie ?, ou il tente d'expliquer l'hérédité biologique par les lois de la physique et son livre a joué un grand rôle dans la découverte du code génétique. Il reçoit un prix Nobel de physique en 1933 relatif à ces travaux antérieurs.

À la même époque W. Heisenberg arrive à la conclusion suivante :

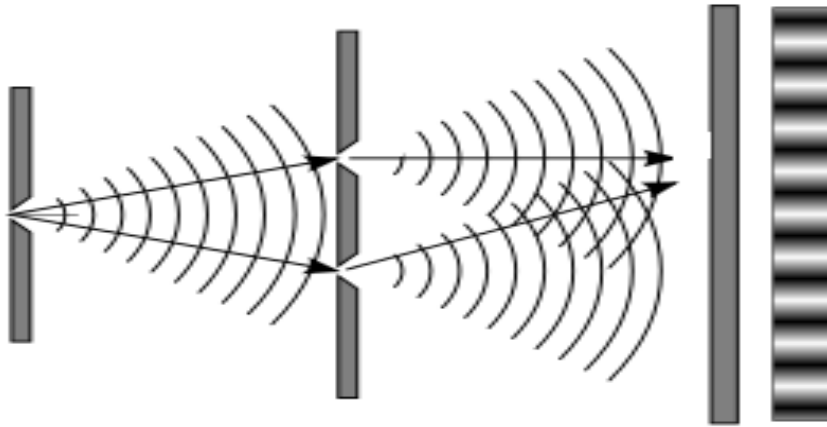
Il est impossible de déterminer avec précision la position et la vitesse d'une particule simultanément. Ceci proviendra du fait que cette dernière est toujours perturbée par son interaction avec l'instrument de mesure. Localiser un électron à l'aide de la lumière implique une interaction entre cet électron et un photon. Pour localiser plus précisément la position, il faut utiliser un photon de longueur d'onde plus petite, donc plus énergétique, qui produit sur l'électron qu'il heurte un changement de vitesse plus important. Pour mesurer plus précisément la vitesse de l'électron, il faut au contraire utiliser des photons moins énergétiques, donc de longueur d'onde plus grande, mais on perd alors en précision sur la position.

W. Heisenberg élabore ainsi la mécanique matricielle : au lieu d'utiliser comme Schrödinger une équation différentielle pour décrire l'évolution d'un système quantique, il utilise des objets mathématiques peu familiers aux physiciens de l'époque : des tableaux de nombres appelés matrices, qui ont la propriété de ne pas forcément commuter. La position et la vitesse des particules sont décrites par des matrices. L'impossibilité de déterminer simultanément avec précision la position et la vitesse d'une particule se traduit par le fait que la matrice correspondant à la position et celle correspondant à la vitesse ne commutent pas. Alors en se basant sur les expériences tels que Les fentes de Young, l'effet photoélectrique les chercheurs de l'époque cherchent à mieux interpréter ces expériences d'où naissance de la mécanique quantique. Nous en donnerons ici un bref aperçu.

## **I.2 Expérience de Young :**

Cette expérience a été faite vers les années 1897 avec l'utilisation d'une source lumière qui émette une lumière monochromatique, cette lumière va traverser deux ouvertures  $S_1$  et  $S_2$  séparés par une distance de l'ordre de  $a = S_1 S_2$ .

Après l'émission de cette lumière à travers  $S_1$  et  $S_2$  on les interfère dans un écran distance de  $D$  des sources.



**Figure I-1: Expérience d'interférences des fentes d'Young**

On éclaire deux fentes  $S_1$  et  $S_2$  par une source lumineuse S et à une distance D on récupère les interférences ainsi observés. En se basant sur la nature ondulatoire décrite par Maxwell en électrodynamique classique on écrit [2].

La source S émet une lumière de la forme :  $Ae^{i\omega t}$

En fermant  $S_2$  et en laissant  $S_1$  ouverte la lumière passe par  $S_1$  alors M oscille après un retard.

De  $\frac{S_1M}{c}$  par rapport à la source  $S_1$  son élongation  $y_1$  s'écrit :

$$y_1 = Ae^{i\omega(t - \frac{S_1M}{c})} \quad (I - 1)$$

Maintenant on ferme  $S_1$  et en laissant  $S_2$  ouverte la lumière passe par  $S_2$  alors M oscille après un retard de  $\frac{S_2M}{c}$  par rapport à la source  $S_2$  son élongation  $y_2$  s'écrit :

$$y_2 = Ae^{i\omega(t - \frac{S_2M}{c})} \quad (I - 2)$$

En ouvrant les deux fentes simultanément M oscille avec l'élongation y résultante de  $y_1$  et  $y_2$  (conséquence du théorème de superposition) :

$$y = y_1 + y_2 \quad (I - 3)$$

L'intensité lumineuse est proportionnelle au carré du module de y :

$$I \propto yy^* \quad (I - 4)$$

Après substitution des expressions de  $y_1$  et  $y_2$  dans I on obtient :

$$I \propto (y_1 + y_2)(y_1 + y_2)^* \quad (I - 5)$$

Avec :

$$\omega = \frac{2\pi}{T} \text{ Et } \lambda = cT$$

$$I \propto (|A|^2 + |A|^2 + |A|^2 e^{i\frac{2\pi}{\lambda}(S_2M - S_1M)} + |A|^2 e^{-i\frac{2\pi}{\lambda}(S_2M - S_1M)}) \quad (I - 6)$$

$$I \propto 2|A|^2 \left( 1 + \cos \frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) \right) \quad (\text{I} - 7)$$

Distinguons deux cas extrêmes relatifs aux franges brillantes et aux franges obscurs.

Pour le cas des franges brillantes :

$$\cos \frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) = 1 \quad (\text{I} - 8)$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) = 2k\pi \quad (\text{I} - 9)$$

$$(S_2M - S_1M) = k\lambda \quad (\text{I} - 10)$$

On dit que la différence de marche  $(S_2M - S_1M)$  est un nombre entier de  $\lambda$ .

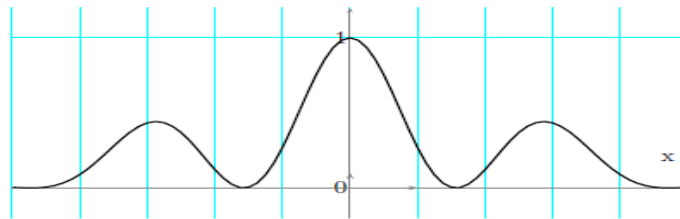
Pour le cas des franges brillantes :

$$\cos \frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) = -1 \quad (\text{I} - 11)$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) = (2k + 1)\pi \quad (\text{I} - 12)$$

$$(S_2M - S_1M) = (2k + 1) \frac{\lambda}{2} \quad (\text{I} - 13)$$

On dit que la différence de marche  $(S_2M - S_1M)$  est un nombre impair de  $\frac{\lambda}{2}$ .



**Figure I-2 : Représentation de l'intensité lumineuse en fonction de la distance**

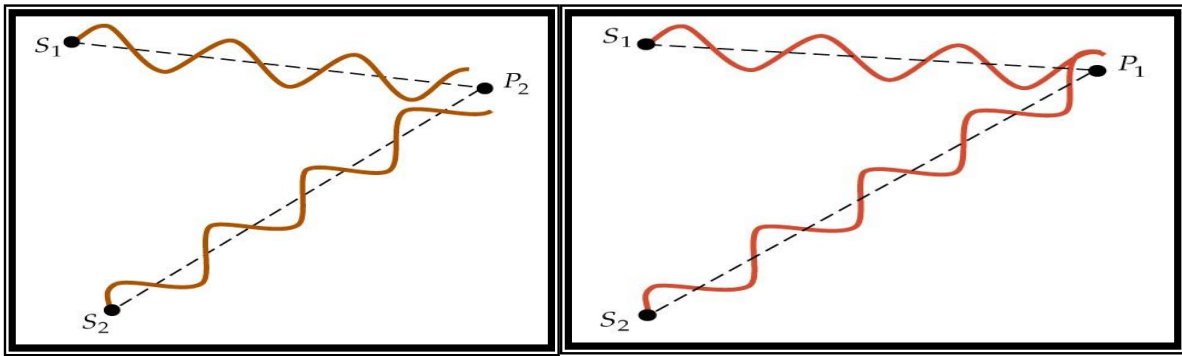
Les interférences constructives ( $A_T = 2A$ ) sont définies par :

$$\delta = m\lambda (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (\text{I} - 14)$$

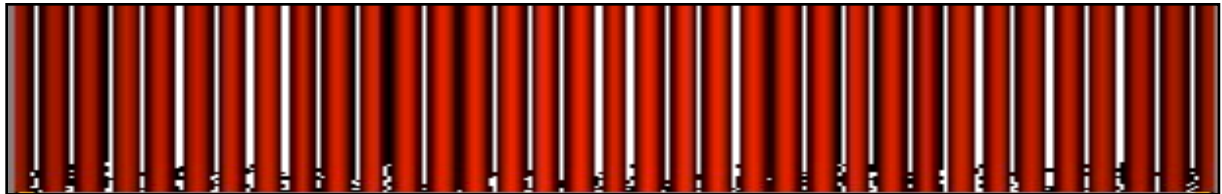
Les interférences destructives ( $A_T = 0$ ) sont données par :

$$\delta = (m + 1/2)\lambda (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (\text{I} - 15)$$

Pour mieux éclaircir cette interprétation les figures I(a) et I(b) montrent certaines causes induites par la différence de phase entre 2 ondes harmoniques.



**Figure I-3: Différence de marche de parcours  $\delta$**



**Figure I-4 écran d'observation**

Position des maxima:

$$d \sin\theta = m\lambda \quad (\text{ou } m = 0,1,2,3 \dots) \quad (\text{I} - 16)$$

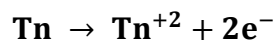
Position des minima:

$$d \sin\theta = (m + 1/2)\lambda \quad (\text{ou } m = 1,2,3 \dots) \quad (\text{I} - 17)$$

### **I.3 Effet photoélectrique :**

L'effet photoélectrique est l'émission d'électrons par un matériau généralement métallique lorsque celui-ci est exposé à une lumière c ultraviolette, où le bombardement induit par cette fréquence est le résultat de ce fameux phénomène.

Alors en éclairant une plaque métallique généralement construit d'un filament le tungstène (Tn) métal de transition celle-ci émet des électrons.



D'ailleurs ce phénomène se produit aussi avec d'autres matériaux si la longueur d'onde est assez courte c'est-à-dire plus la longueur d'onde est courte, plus l'intensité de l'onde est importante et donc plus elle est énergétique.

La figure 2 illustre ce que nous avons dit auparavant.

Longueur d'onde  $\lambda = c / \nu$

L'émission de chaque électron (ligne bleue) requiert une quantité minimale d'énergie, laquelle est apportée par un photon (ligne rouge).

Avant la lumière était une onde électromagnétique de longueur d'onde  $\lambda$  où l'interprétation de l'expérience de Young a été faite avec succès par le Grand physicien C. Maxwell selon ces quatre équations fondamentales.

L'expérience de l'effet photoélectrique a bouleversé la physique via la nature ondulatoire de la lumière. Les physiciens cherchent à construire un modèle accessible à mieux expliquer ce phénomène d'une manière rigoureuse.

Maxwell a construit un modèle pour expliquer l'expérience mais lors de son exécution une divergence ultra violette apparaît au niveau de la densité lumineuse.

Ce qui a laissé le maître de la physique A. Einstein de trouver la bonne explication de cette effet via une autre nature de la lumière dite nature corpusculaire en affirmant que l'absorption d'un photon, permettait d'expliquer parfaitement toutes les caractéristiques de ce phénomène. Les photons de la source lumineuse possèdent une énergie caractéristique déterminée par la fréquence de la lumière. Lorsqu'un électron du matériau absorbe un photon et que l'énergie de celui-ci est suffisante, l'électron est éjecté; sinon l'électron ne peut s'échapper du matériau. [3]

Après l'absorption du photon par l'atome, le photoélectron émis une énergie.

$$E_c = E_g - E_b \quad (I - 18)$$

où  $E_b$  : est l'énergie de liaison du photoélectron.

À des énergies et des numéros atomiques où ce processus est important, l'électron émis est absorbé sur une distance très courte de telle manière que toute son énergie est enregistrée dans le détecteur. Les rayons X qui sont émis dans la réorganisation du cortège électronique suite à l'émission de l'électron sont également absorbés dans le milieu.

L'énergie d'un photon est caractérisée par la formule

$$E = h \cdot \nu \quad (I - 19)$$

Une relation fondamentale découverte par A. Einstein sur aux travaux de Planck.

Exprimant la proportionnalité de l'énergie à la fréquence.

#### **I.4 Modèle de Bohr (1913) :**

Pour expliquer ces observations expérimentales et ces formulations empiriques, Bohr a été amené à admettre deux postulats nouveaux : 1- Les électrons ne s'observent que dans des



orbites “permises” dans lesquelles ils ont des énergies bien déterminées : ces orbites sont définies par la condition de quantification :

$$\int \vec{p} \cdot d\vec{l} = nh \quad (I - 20)$$

Où  $n$  est un nombre entier positif appelé nombre quantique.

Cette condition se simplifie lorsqu'on admet un mouvement circulaire des électrons autour du noyau supposé immobile, et donne :

$$n\lambda = 2\pi r \quad \text{avec } \lambda = \frac{h}{mv} \quad mvr = n \frac{h}{2\pi} \quad (I - 21)$$

2- Quand l'électron décrit une orbite stationnaire, l'atome ne met (ni n'absorbe) aucun rayonnement. L'émission (ou l'absorption) est déterminée uniquement par le passage de l'électron d'une orbite d'énergie  $E_n$  à une orbite d'énergie plus petite (ou plus grande)  $E_m$  (fig I.4). La fréquence  $\nu_{nm}$  du rayonnement émis (ou absorbé) est donnée par :

$$\nu_{nm} = \frac{1}{h}(E_n - E_m) \quad (I - 22)$$

## I.5 Construction de l'équation de Schrödinger :

Le physicien autrichien Erwin Schrödinger(1) utilise les résultats de Broglie pour établir une équation régissant l'évolution spatiale et temporelle de la fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$  d'un système physique.

Pour obtenir l'équation de Schrödinger, en prenant la formule de l'onde plane de Broglie :

$$\psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{K}\vec{r} - \omega t)} \quad (I - 23)$$

Dans la suite, il sera plus intéressant de considérer la pulsation  $\omega$  et nombre d'onde  $K$ , qui d'après les postulats de la mécanique quantique sont liés à la particule classique par :

$$E = \hbar\omega \quad (I - 24)$$

$$P = \hbar K \quad (I - 25)$$

Alors :

$$\psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{P}\vec{r} - Et)} \quad (I - 26)$$

On remarque alors qu'en dérivant l'onde par rapport au temps, il vient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} E A e^{i(\vec{P}\vec{r} - Et)} = -\frac{i}{\hbar} E \psi(\vec{r}, t) \quad (I - 27)$$

$$E \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \quad (I - 28)$$

Alors :

$$\vec{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (I - 29)$$

$\vec{E}$ : L'opérateur d'énergie.

De même le gradient de cette fonction d'onde donne :

$$\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t) = \frac{i}{\hbar}\vec{P}\psi(\vec{r}, t) \quad (I - 30)$$

D'où :

$$\hat{P} = -i\hbar\vec{\nabla} \quad (I - 31)$$

$\vec{P}$  : L'opérateur d'impulsion.

Avec :

$$\vec{\nabla} = \vec{I} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{J} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{K} \frac{\partial}{\partial z} \quad (I - 32)$$

Pour une particule libre, d'après la mécanique classique, l'énergie mécanique est donné par :

$$E = E_c = T = \frac{p^2}{2m} \quad (I - 33)$$

Cette quantité apparait dans la formulation hamiltonienne pour une particule libre  $U(r) = 0$  de la mécanique classique.

En appliquant le principe de correspondance entre les valeurs classiques et quantique, pour l'énergie, de l'équation (I-33) et (I-28) on obtient :

$$\frac{p^2}{2m}\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) \quad (I - 34)$$

Pour l'impulsion:  $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$  on a :

$$\frac{p^2}{2m}\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla})^2\psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{r}, t) \quad (I - 35)$$

Donc l'équation de Schrödinger devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) \quad (I - 36)$$

Ou :  $\vec{\nabla}^2 = \Delta$  est Laplacien.

L'opérateur hamiltonien du système pour une particule libre s'écrit :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad (I - 37)$$

En utilisant cet opérateur, on peut simplifier l'écriture de l'équation de Schrödinger.

On obtient :

$$\hat{H}\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) \quad (I - 38)$$

Lorsque la particule est plongée dans un potentiel scalaire  $U(r)$  (par exemple le potentiel d'un oscillateur harmonique) d'après la mécanique classique, l'énergie totale du système s'écrit comme suit :

$$E = T + U(r) = \frac{p^2}{2m} + U(r) \quad (I - 39)$$

Avec cette nouvelle valeur d'énergie et à partir de l'énergie (I-29) et l'opérateur d'impulsion  $\hat{p}$ , l'équation de Schrödinger devient :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \right] \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \quad (I - 40)$$

L'énergie totale ce n'est que l'opérateur Hamiltonien du système.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \quad (I - 41)$$

En utilisant cet opérateur, on peut simplifier l'équation de Schrödinger.

$$\vec{H}\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \quad (I - 42)$$

## I.6 Le flux de courant de probabilité :

Par analogie avec le vecteur pointing pour le rayonnement E M, nous pouvons vouloir connaître la probabilité actuelle dans une situation physique. Par exemple, dans notre solution de particules libres, la densité de probabilité est uniforme sur tout l'espace, mais il y a un flux net le long de la direction de la quantité de mouvement.

Nous pouvons dériver une équation montrant la conservation de la probabilité (voir section 7.5.2), par différenciant  $P(x, t) = \psi^*\psi$  et en utilisant l'équation de Schrödinger.

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (I - 43)$$

C'est l'équation de conservation habituelle si  $j(x, t)$  est identifié comme le courant de probabilité

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right] \quad (I - 44)$$

Ce courant peut être calculé à partir de la fonction d'onde.

Si nous intégrons si sur un intervalle en x

$$\int_a^b \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} dx = - \int_a^b \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} dx \quad (I - 45)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b p(x, t) dx = j'(x = a, t) - j(x = b, t) \quad (I - 46)$$

L'équation dit que le taux de changement de probabilité dans un intervalle est égale au flux de probabilité entrant dans l'intégrale moins le flux sortant.

Etendre cette analyse à 3 dimensions :

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad (I - 47)$$

Avec :

$$j(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[ \psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}, t) \right] \quad (I - 48)$$

## I.7 L'équation de Schrödinger dépendante du temps :

L'équation normale que nous obtenons, pour d'ondes sure une, relie la seconde dérivée spatial à la seconde dérivée temporelle .l'équation de Schrödinger utilise uniquement la dérivée première, pourtant, l'ajout du  $i$  relie la partie réel de la fonction d'onde à la partie imaginaire, en effet décalant la phase de 90degrés comme le ferait la 2<sup>eme</sup> dérivée.

$$\frac{-\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + v(x)\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \quad (I - 49)$$

L'équation de Schrödinger est construire pour une fonction d'onde complexe.

Quad Dirac a essayé de faire une version relativiste de l'équation, ou la relation énergétique est un peu plus compliquée, il a découvert une nouvelle physique.

L'équation de Schrödinger indépendante du temps :

Equations différentielles du second ordre, comme l'équation de Schrödinger, peut être résolu par séparation de variables.

Ces solutions séparées peuvent ensuite être utilisées pour résoudre le problème en général.

$$L(a\psi + b\phi) = aL\psi + bL\phi \quad (I - 50)$$

Ou  $a$  et  $b$  sont des constantes arbitraires et  $\psi$  et  $\phi$  sont une fonction d'onde arbitraires.

Une constante multiplicative est un opérateur linéaire simple. Les operateurs différentiels sont clairement linéaires aussi.

Un exemple d'opérateur non linéaire (que nous n'utiliserons pas) est  $N$  qui a la propriété

$$N\psi = \psi^2 \quad (I - 51)$$

Equation de conservation de probabilité :

Partir de la probabilité et différencier par rapport au temps

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\psi^*(x, t)\psi(x, t)) = \left[ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] \quad (I - 52)$$

Utiliser l'équation de Schrödinger.

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + v(x)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (I - 53)$$

Et son complexe conjugué :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + v(x)\psi^* = i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \quad (I - 54)$$

(On suppose que  $v(x)$  est réel. Les potentiels imaginaires font que la probabilité n'est pas conservée)

Maintenant nous devons brancher ces équation dans :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi - V(x)\psi^*\psi + \frac{-\hbar^2}{2m} \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi^*\psi \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] = \frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] \quad (I - 55) \end{aligned}$$

C'est l'équation de conservation habituelle si  $j(x, t)$  est identifie comme la probabilité eurent.

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0$$

(I – 56)

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right]$$

### **Conclusion :**

Après avoir connu l'émergence de la physique quantique et comment trouver l'équation de Schrödinger, nous discuterons sa résolution d'une manière approchée au deuxième chapitre, ceci ou fuite que l'énergie potentiel n'as pas la forme exacte.

## **Référence :**

- [1] S. Kouidri polycopie sur la mécanique quantique 2013.
- [2] C. COHEN-TANNOUDJI, B.DIU et F. LALOE Mécanique quantique - Tome 1 Edition Hermann édition 1977
- [3] HABIB BOUCHRIHA Introduction `a la mécanique physique cours et applications 2002
- [4] Mécanique Quantique Licence de Sciences Physiques et Chimiques Université de Lorraine Christophe CHATELAIN, 2016

# **Chapitre II**

## **Equation de Schrodinger dans un potentiel constant**

## II.1 Introduction :

**N**ous avons vu au chapitre précédent que la lumière était considérée comme étant une onde électromagnétique en premier lieu et en second est formée de corpuscules d'énergie  $h\nu$  de ce fait l'histoire de la physique moderne commence de ce point de la considération de A. Einstein en 1905 suite à ces travaux de recherche justifiant le concept des photons et la célèbre interprétation de l'effet photoélectrique en assimilant son modèle par analogie avec la distribution des molécules dans un gaz discret [1].

Ces travaux ont permis aussi à l'explication du rayonnement des corps noirs et le concept quantique commence à se dérouler. Cette démarche a mené les physiciens pas à pas dans un monde étrange durant toute une décennie de 1905 à 1913 et le phénomène des transitions électroniques entre les orbites prend axe dans ce domaine.

Après 10 ans plus tard L. De Broglie a donné une interprétation plus profonde aux orbites de Bohr en suggérant même que les électrons sont aussi des ondes et la condition de quantification revient à dire qu'il y a un nombre entier de  $\lambda$  qui est présent dans le cercle. Nous en donnerons ici l'origine de la fameuse équation dite Equation de Schrodinger [2].

## II.2 L'origine de l'équation de Schrodinger :

Erwin Schrödinger expose les idées de Louis de Broglie les ondes de matière en posant des questions : Qu'est-ce que c'est que cette onde qui n'a pas d'équation ? En effet, en général, les physiciens normalement posent d'abord des équations, puis ils cherchent à les résoudre mais dans ce cas, au contraire, de Broglie avait d'abord postulé l'existence d'une onde sans en avoir posé d'équation.

Alors à la suite de son réflexion, Schrödinger entame sa recherche et trouve en 1925 une équation valable pour les ondes de Louis de Broglie, justifiant bien ainsi les fondamentales bases de la mécanique ondulatoire reposant sur le principe d'équivalence entre la mécanique ondulatoire et la nouvelle mécanique dite aussi mécanique quantique et déduisant avec l'utilisation des 4 équations essentiels de Maxwell sa nouvelle équation nommé sur son nom.



Alors avec l'électromagnétisme et suite au mouvement ondulatoire de la lumière dans un milieu d'indice de réflexion  $n$  l'équation ondulatoire s'écrit:

$$\Delta \vec{E} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \vec{0} \quad (\text{II} - 1)$$

$$\Delta \vec{B} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = \vec{0} \quad (\text{II} - 2)$$

Avec ces équations qui décrivent l'évolution de l'onde électromagnétique dans le vide et pour un champ électrique de la forme:

$$\vec{E} = E_0 e^{i(\omega t - kx)} \quad (\text{II} - 3)$$

On obtient :

$$\Delta \vec{E} - \frac{1}{v^2} (-\omega^2) \vec{E} = \vec{0} \quad (\text{II} - 4)$$

Qui devienne:

$$\Delta \vec{E} + \frac{\omega^2}{v^2} \vec{E} = \vec{0} \quad (\text{II} - 5)$$

Avec  $\frac{\omega^2}{v^2} = k^2$  est le carré du vecteur d'onde.

Arrivé à ce point, la même équation est valable en mécanique quantique à la place de  $\vec{E}$  on substitue la fonction d'onde  $\psi(x)$  toute en remplaçant  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  où  $E$  est l'énergie cinétique.

Seulement ici on devrait préciser ce point, pour une particule libre on devrait remplacer  $k^2$  par  $\frac{2mE}{\hbar^2}$  mais pour une particule liée l'énergie cinétique est  $(E - V(x))$  avec  $V(x)$  l'énergie potentielle. Le nouveau vecteur d'onde s'écrit alors comme:

$$k^2 = \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \quad (\text{II} - 6)$$

Maintenant notre nouvelle équation s'écrit:

$$\Delta \psi + \psi \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} = 0 \quad (\text{II} - 7)$$

On l'appelle équation de Schrödinger pour une particule liée. Etudions maintenant les différents cas possible:

L'équation de l'onde dans un milieu caractérisée par un indice de réfraction  $n$  :

$$\Delta \vec{E} + \frac{\omega^2}{v^2} \vec{E} = \vec{0} \quad (\text{II} - 8)$$

$$\frac{\omega^2}{v^2} = k^2 n^2 \quad (\text{II} - 9)$$

Où  $n = \frac{c}{v}$  est l'indice de réfraction.

L'analyse de cette dernière équation nous donne :

Qui donne pour des énergies  $E > V(x)$  un indice de réfraction positif et par conséquent la particule franchit le potentiel et continue son mouvement sans aucune atténuation

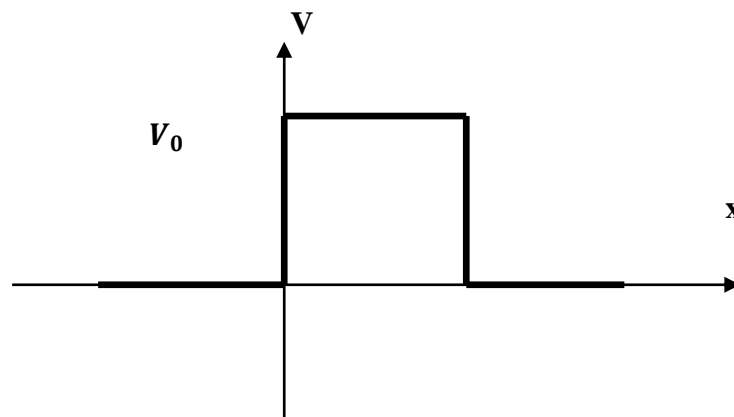
$$n = \frac{1}{\hbar k} \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (\text{II} - 10)$$

Mais pour des énergies  $E < V(x)$ , l'équation donne un indice de réfraction imaginaire pur car  $n^2$  est négatif et on dit que la particule interagit avec le potentiel et son mouvement subit une atténuation ; onde évanescente c'est le cas de la propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu métallique . Maintenant nous distinguons les différents cas possibles de l'équation de Schrödinger par l'analyse de la fonction potentielle toute en étudiant le comportement des solutions de l'équation de Schrödinger. [3]

### II.3 Les solutions de l'équation de Schrödinger

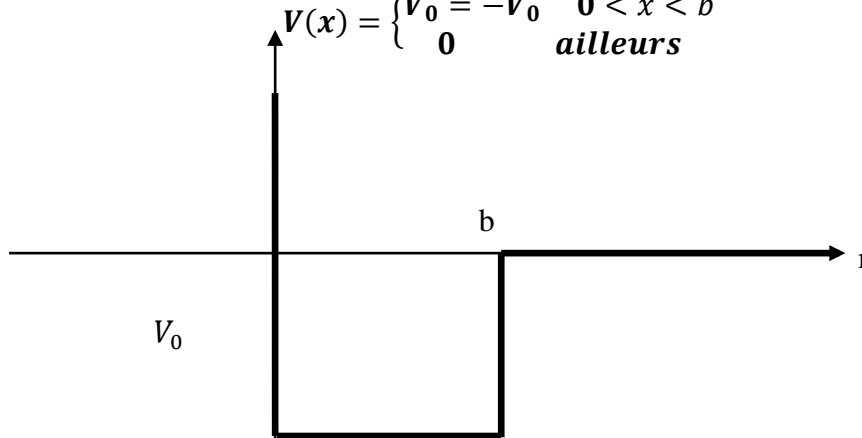
Quand à la résolution de l'équation de Schrödinger à potentiel constant, il existe plusieurs solutions, dans celles-ci :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < b \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$



**Schémas II-1 Barrière de potentiel**

$$V(x) = \begin{cases} V_0 = -V_0 & 0 < x < b \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$



**Schémas II-2 Puits de potentiel**

Qui peuvent être donnée suivant les schémas ci-dessus si l'énergie est suffisante albaïn la particule franchit la barrière sans atténuation dans le cas inverse elle entre en interaction en donnant naissance a des fonctions hyperboliques.

Pour les schémas II-2 on est dans un puits de potentiel ce puits qui se caractérise par une profondeur  $v_0$  ou on aura besoin d'une énergie suffisante pour s'en débarrasser.

## **Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons noté résolu de l'équation de Schrödinger approchée et plus particulièrement pour la présence d'un potentiel constant nous avons discuté l'équation de Schrödinger dans la représentation de Heisenberg c'est-à-dire dépendante du temps. Nous avons discuté aussi le flux de courant ensuit par la présence de la densité de la probabilité

## Référence

- [1] S. Koudri Polycopie Exercice resolu en mécanique quantique edition 2013.
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B.Diu et F.Laloe Mécanique quantique - Tome 1 Edition Hermann édition 1977
- [3] HABIB BOUCHRIHA Introduction `a la mécanique physique cours et applications 2002
- [4] Mécanique Quantique Licence de Sciences Physiques et Chimiques Université de Lorraine Christophe Chatelain, 2016

**Chapitre III**  
**Résolution**  
**numérique de**  
**l'équation de**  
**Schrödinger pour un**  
**potentiel constant**  
**Application au**  
**Deutérium**

### III.1 Introduction :

Nous arrivons à la partie la plus laborieuse de notre travail où nous allons convertir de ce que nous avons vu aux chapitres précédents en des équations numériques accessibles au travail. Notre travail consiste à déterminer la relation entre les amplitudes  $k_1/k_2$  et la largeur du puits de potentiel  $b$ .

Nous présentons notre méthode de calcul numérique.

Nous en donnerons ici un bref aperçu :

### III.2 Méthode des différences finies :

Pour résoudre numériquement l'équation de Schrödinger dans un potentiel constant, il semble pertinent d'appliquer la méthode de discrétisation de l'espace et des opérateurs. Sous les hypothèses que  $\psi(x)$  est au moins de classe  $C^2$ , un développement de Taylor nous permet d'écrire les deux égalités suivantes :

$$\Psi(x+h) - \Psi(x) = h \frac{d\Psi(x)}{dx} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + O(h^3) \quad (III-1)$$

$$\Psi(x-h) - \Psi(x) = -h \frac{d\Psi(x)}{dx} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + O(h^3) \quad (III-2)$$

Le somme de ces deux égalités :

$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} = \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + O(h^2) \quad (III-3)$$

Apparaît alors équivalent discret de l'opérateur  $\Delta$  (à une dimension, mais le cas à trois dimensions s'en déduit aisément). La précision de cette expression est en  $O(h^2)$ .

En discrétisant l'espace d'un pas "h" et en injectant le résultat précédent dans l'équation de Schrödinger, il vient :

$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} + f(x)\Psi(x) + O(h^2) = 0 \quad (III-4)$$

$$\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x) + h^2 f(x)\Psi(x) + O(h^4) = 0 \quad (III-5)$$

Avec :  $f(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))$ .

En faisant la somme entre (III-4)-(III-5) nous obtenons :

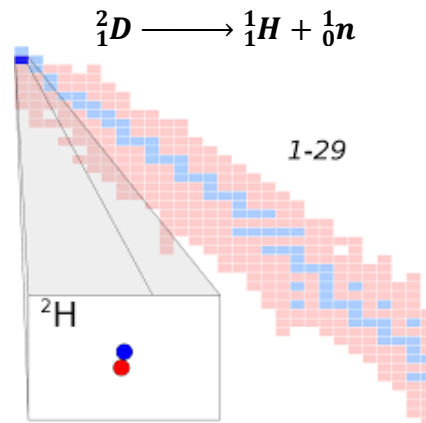
Cette équation peut être réécrite de façon à faire apparaître une relation de récurrence entre les valeurs de  $\psi$  aux nœuds du maillage. Le pas de la discrétisation est fixé à  $h$  et l'origine est définie par le point  $O$ .

Lors de la résolution numérique, l'algorithme débute à  $x = -2\hbar$ . La connaissance des deux premières valeurs de  $\psi_n$  (il s'agit de l'onde plane écrite précédemment) permet d'initier la récurrence qui donne accès à tous les  $\Psi_n$ .

### III.3 Application au deutérium

#### III.3.a Présentation de notre élément chimique

Le deutérium, symbolisé  $2H$  ou  $D$ , est un isotope naturel stable de l'hydrogène. Son noyau atomique, appelé deuton ou deutéron, possède un proton et un neutron, d'où un nombre de masse égal à deux. Le deutérium a été découvert en 1931 par Harold Clayton Urey, un chimiste de l'université Columbia. Cette découverte lui valut le prix Nobel de chimie en 1934.



**Figure III-1 : Représentation du deutérium**

#### III.3.b Calcule de l'énergie liaison : connaissant la masse du proton et du neutron

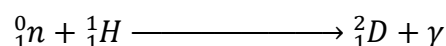
nous calculons la masse du noyau du deutérium comme :

$$\begin{aligned}
 m(n_1^0) &= 1.0072764 \\
 m(p_1^1) &= 1.008665 \\
 m(D) &= m(n_1^0) + m(p_1^1) \\
 &= 1.0072764 + 1.008665 \\
 &= 2.015941 \text{ u} \\
 m(\text{noyau}) &= m(e) - m(D) \\
 &= -2.015941 + 0.000549 \\
 E_l &= -2.013553 * 931.5 \text{ Mev} \\
 E_l &= -2.2244 \text{ Mev}
 \end{aligned}$$

Avec :  $C^2=931.5\text{Mev}$

Cette valeur est en bon accord avec la valeur experimental qui est de l'ordre de  $-2.225\text{Mev}$  [2].

Elle est perdue sous forme d'une radiation réussie vers le milieu externe



Maintenant revenant à notre fameuse équation de Schrödinger suivante :

$$H\psi = E\psi \quad (III-6a)$$

Où notre hamiltonien est l'énergie cinétique plus l'énergie potentielle.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v(r) \quad (III-6b)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v(r)\right)\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (III-6c)$$

$$\Delta_{r,\theta,\varphi} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2 \hbar^2}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2 \hbar^2}\right) + v(r)\right)\psi = E\psi \quad (III-7)$$

$$L^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi \quad (III-7)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(r, \theta, \varphi) - \frac{\hbar^2}{m \cdot r} \frac{\partial}{\partial r} \psi(r, \theta, \varphi) + \frac{L^2}{2mr^2} \psi(r, \theta, \varphi) + v(r)\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (III-8)$$

Séparation de la variable :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \gamma_l^m(\theta, \varphi) \quad (III-9)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \gamma_l^m(\theta, \varphi) \frac{\partial^2}{\partial r^2} R(r) - \frac{\hbar^2}{mr} \cdot \gamma_l^m(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial r} R(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R(r) \gamma_l^m(\theta, \varphi) + v(r)R(r) \gamma_l^m(\theta, \varphi) = ER(r) \gamma_l^m(\theta, \varphi) \quad (III-10)$$

Puisque notre opérateur énergie cinétique contient une dérivée seconde, alors nous allons discrétiser cette dérivée en passant par les développements limites d'une fonction au voisinage de  $x$  qui se simplifier pour  $l=0$  état  $x$  :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} R(r) - \frac{\hbar^2}{mr} \frac{\partial}{\partial r} R(r) + V(r)R(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R(r) = ER(r) \quad (III-11)$$

Pour les fonctions qui nous intéressent nous posons :

$$R(r) = \frac{1}{r} \cdot U(r)$$

L'équation de Schrödinger relative au deutérium s'écrit :

$$H\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (III-12)$$

Où :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \gamma_l^m(\theta, \varphi) \quad (III-13)$$

Avec :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v(r) \quad (III-14)$$

$\Delta$  En coordonnées sphériques s'écrit :

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

Notre fonction solution de l'équation de Schrödinger est fonction propre aussi de  $L^2$  :

$$L^2\psi(r, \theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1)\psi(r, \theta, \varphi) \quad (III-15)$$

$$H\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi)$$



Après substitution de notre fonction dans l'équation de Schrödinger on obtient avec équation radiale :

$$H_r R(r) = ER_l(r)$$

Maintenant, puis que dans le Laplacien apparait le facteur  $\frac{1}{R}$  alors .

Nous à notre cas du deutérium.

Le potentiel est donne par :

$$v(r) = \begin{cases} -v_0 & 0 < r < b \\ 0 & r > b \end{cases}$$

Dans la région 1 :

$$\frac{d^2 U_I(r)}{dr^2} + K_1^2 U_I(r) = 0 \quad (\text{III} - 16)$$

On trouve :

$$U_I(r) = A \sin k_1 r$$

Avec :

$$K_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(v_0 - E_b)}$$

Dans la région2 :

$$\frac{d^2 U_{II}(r)}{dr^2} - \frac{2m}{\hbar^2} E_b = 0 \quad (\text{III} - 17)$$

$$U_{II}(r) = B e^{-k_2 r}$$

Avec :

$$K_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_b}$$

Avec les points de continuité à l'absence  $x=r$

On trouve :

$$U_I(b) = U_{II}(b)$$

$$U_I'(b) = U_{II}'(b)$$

$$k_1 = \frac{0.2187}{\hbar} \sqrt{2m(v_0 - E_b)}$$

$$k_2 = \frac{0.2187}{\hbar} \sqrt{2mE_b}$$

Nous présentons dans la figure (III-1) la variation de l'énergie E en fonction de la largeur du puits de potentiel b.

On remarque d'après cette figure qu'une décroissance totale au fur à mesure que b est large.

### III.4 Organigramme de calcul

Alors résoudre l'équation de Schrödinger revient à utiliser les conditions de continuité entre les deux régions :

$$U_1(b) = U_2(b) \quad (\text{III-18})$$

$$U'_1(b) = U'_2(b) \quad (\text{III-19})$$

Après avoir remplacé nos fonctions d'onde par leurs expressions vues au dessus nous obtenons :

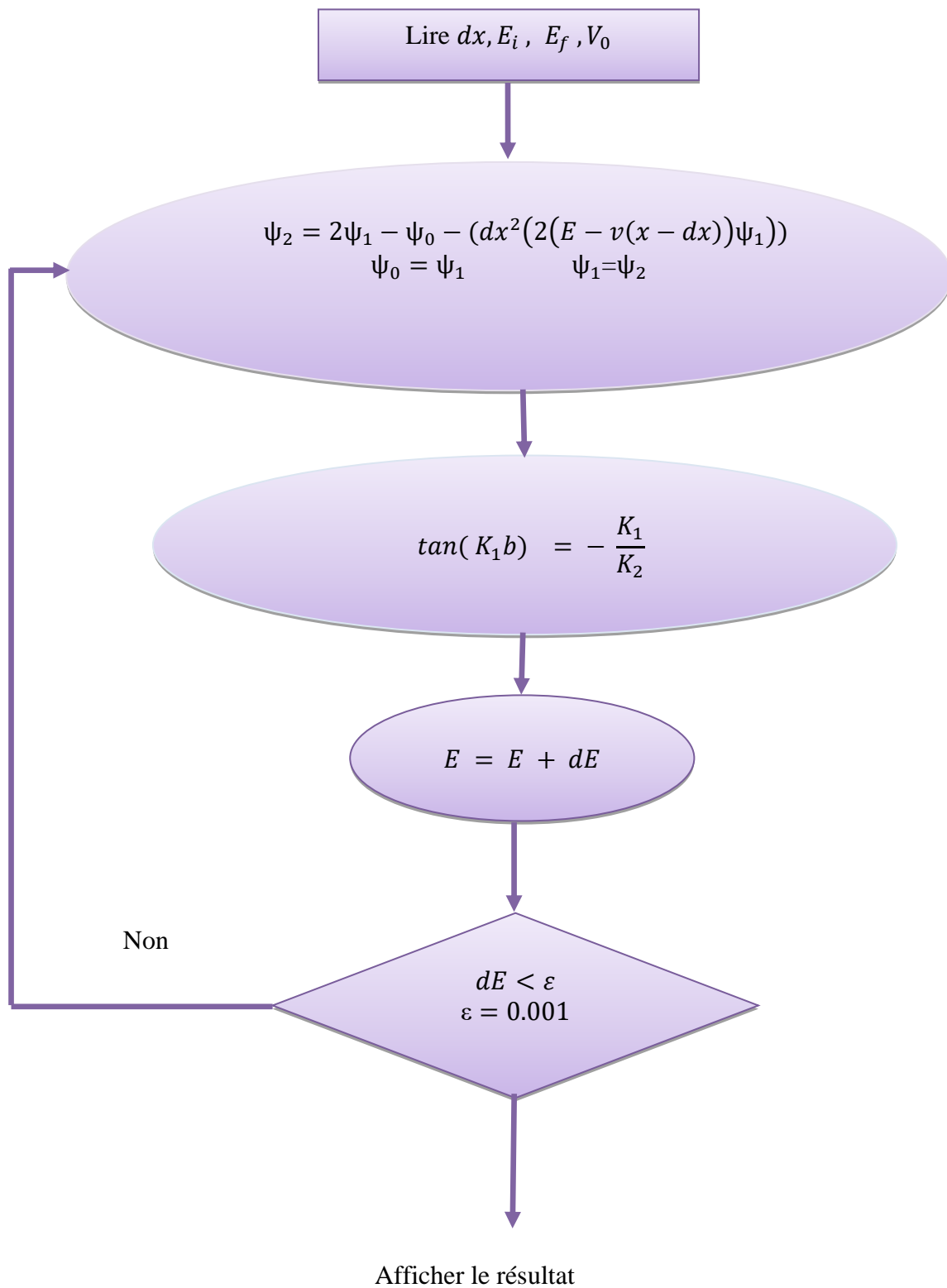
$$\frac{1}{k_1} \tan(k_1 b) = \frac{-1}{k_2} \quad (\text{III-20})$$

Puisque  $E_b$  est fixe (connu) l'équation (III-20) donne pour une profondeur donnée  $-V_0$  du potentiel la largeur  $b$  correspondante (largeur qui produira un état lié (avec moment cinétique =0).

Sa résolution nous donne :

$$b = (1/k_2) \left( \arctan\left(-\frac{k_1}{k_2}\right) + \pi \right) \quad (\text{III-21})$$

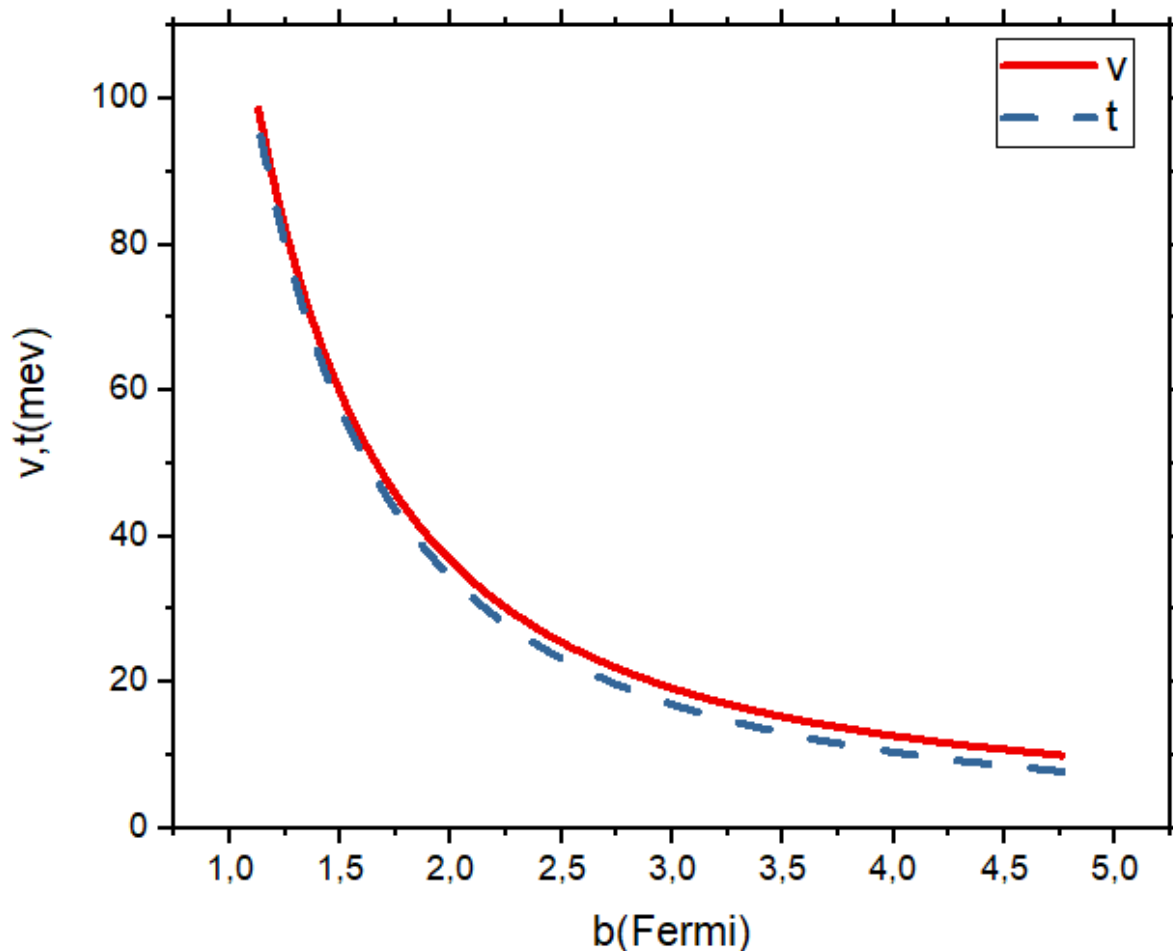
Nous avons étudié que l'état  $s$  du deutérium c'est-à-dire que  $l=0$  et que l'équation radiale se réduit à une équation simple qui se résout facilement.



**Figure III-2 : organigramme de calcul**

## Résultat et discussions

Nos calculs nous donne pour un potentiel  $V_0 = -10$  MeV les résultats suivantes qui sont affichés sur la figure (III-1).



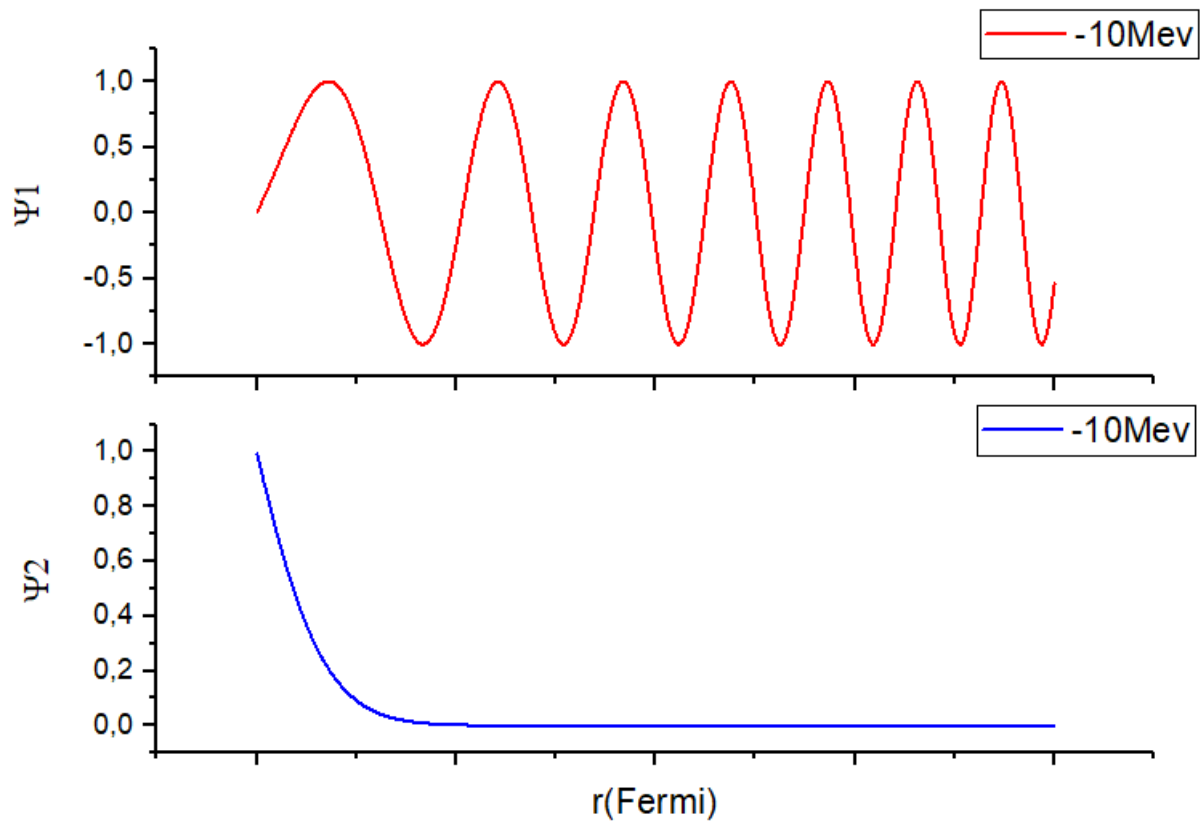
**Figure III-1 : Variation du potentiel en fonction de la largeur du puits b**

$$V_0 = 10$$

$$T = E - V_0$$

La figure (III-1) donne les variations de l'énergie cinétique T et l'énergie potentielle V en fonction de la largeur du puits b pour un potentiel en valeur absolue égal à 10 Mev.

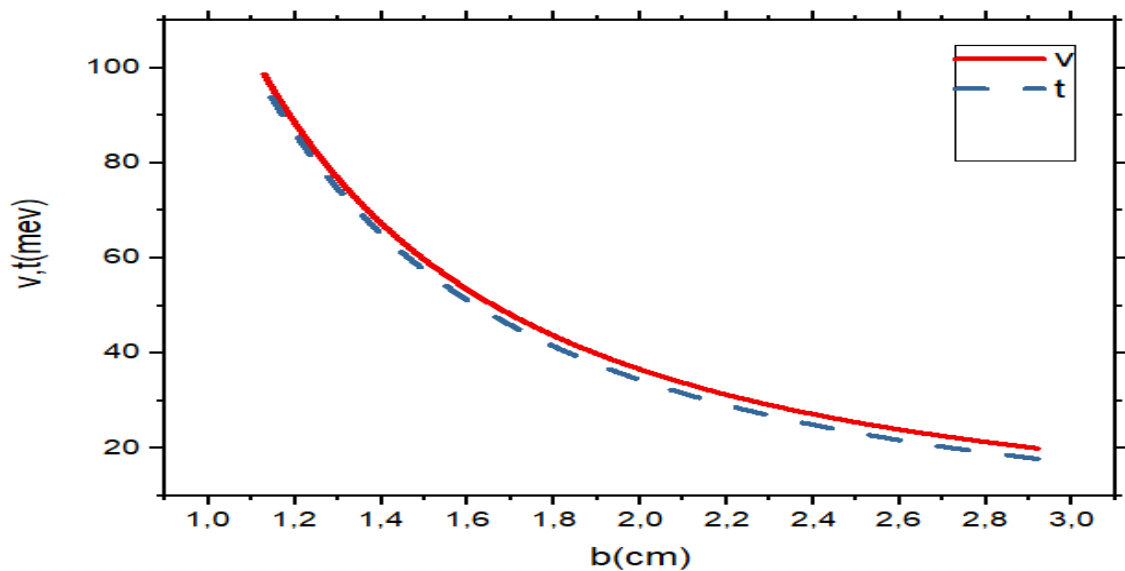
On remarque une décroissance totale au fur a mesure que la largeur b augmente seulement la courbe en pointille est tend vite vis-à-vis la courbe en ligne ce qui signifie que l'énergie potentielle joue un rôle ici.



**Figure III-2 : Présentation de la fonction d'onde en fonction du rayon r**

La figure (III-2) présente l'évolution des fonctions d'onde des deux régions ainsi défini

La première région nous une fonction sinusoïdale par contre la deuxième région est hyperbolique.



**Figure III-3 : Variation du potentiel en fonction de la largeur du puits b**

$$V_0 = 20$$

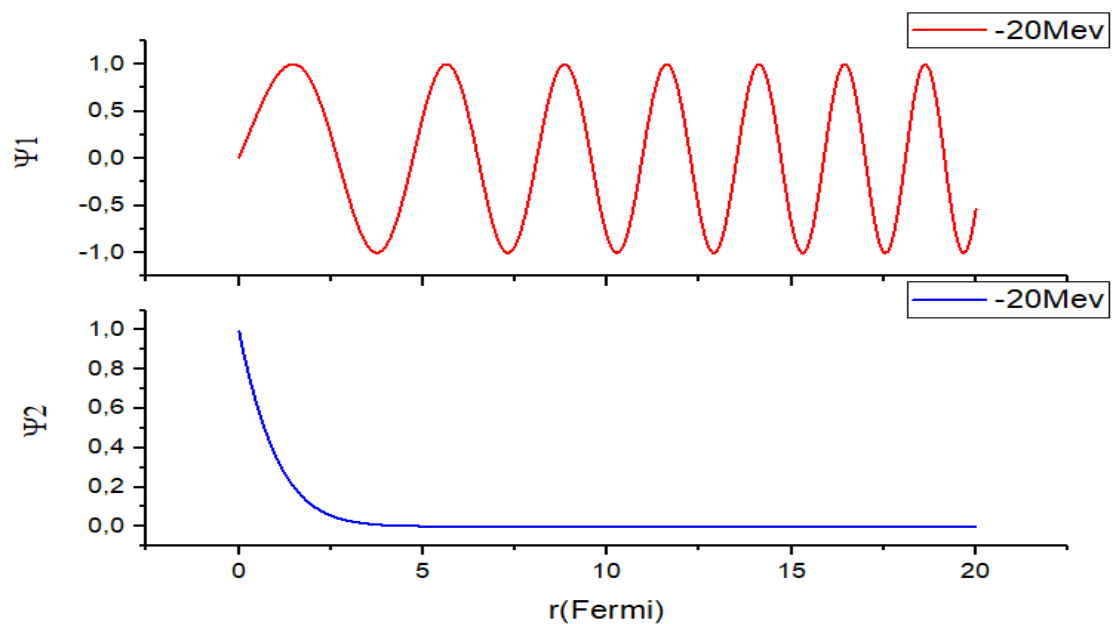
;

$$T = E - V_0$$

Maintenant nous allons essayer de donner au potentiel  $V_0$  des valeurs absolues de l'ordre 20Mev, 30Mev, 40Mev etc....et nous cherchons comment il affecte les variations des fonctions d'onde.

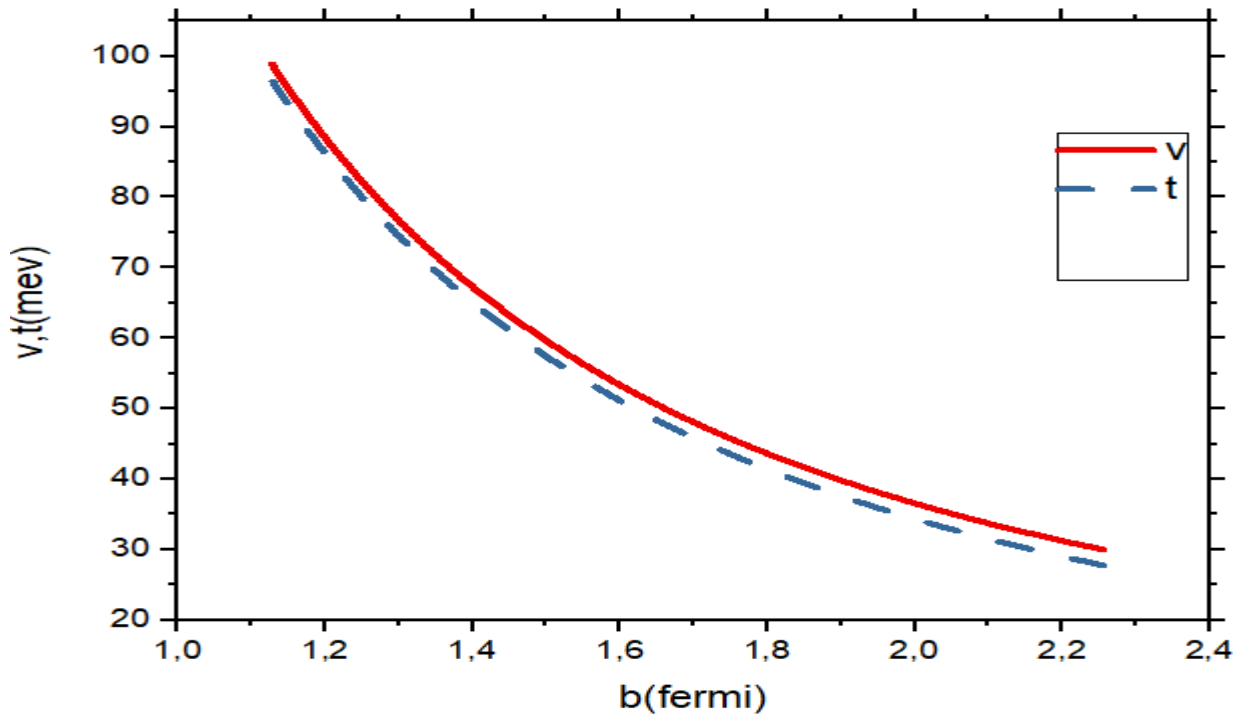
Nous remarquons que les fonctions d'onde de la première région oscille entre les valeurs extrêmes +1 et -1 et que la largeur de la largeur c'est elle qui s'élargit au fur a mesure que le potentiel augmente en valeur absolue.

Nous remarquons aussi que pour la deuxième région ou la variation est hyperbolique au fur a mesure que le potentiel  $V_0$  augment en valeur absolue alors la fonction de la région II tend à s'atténuer en donnant une petite largeur au voisinage de l'origine.

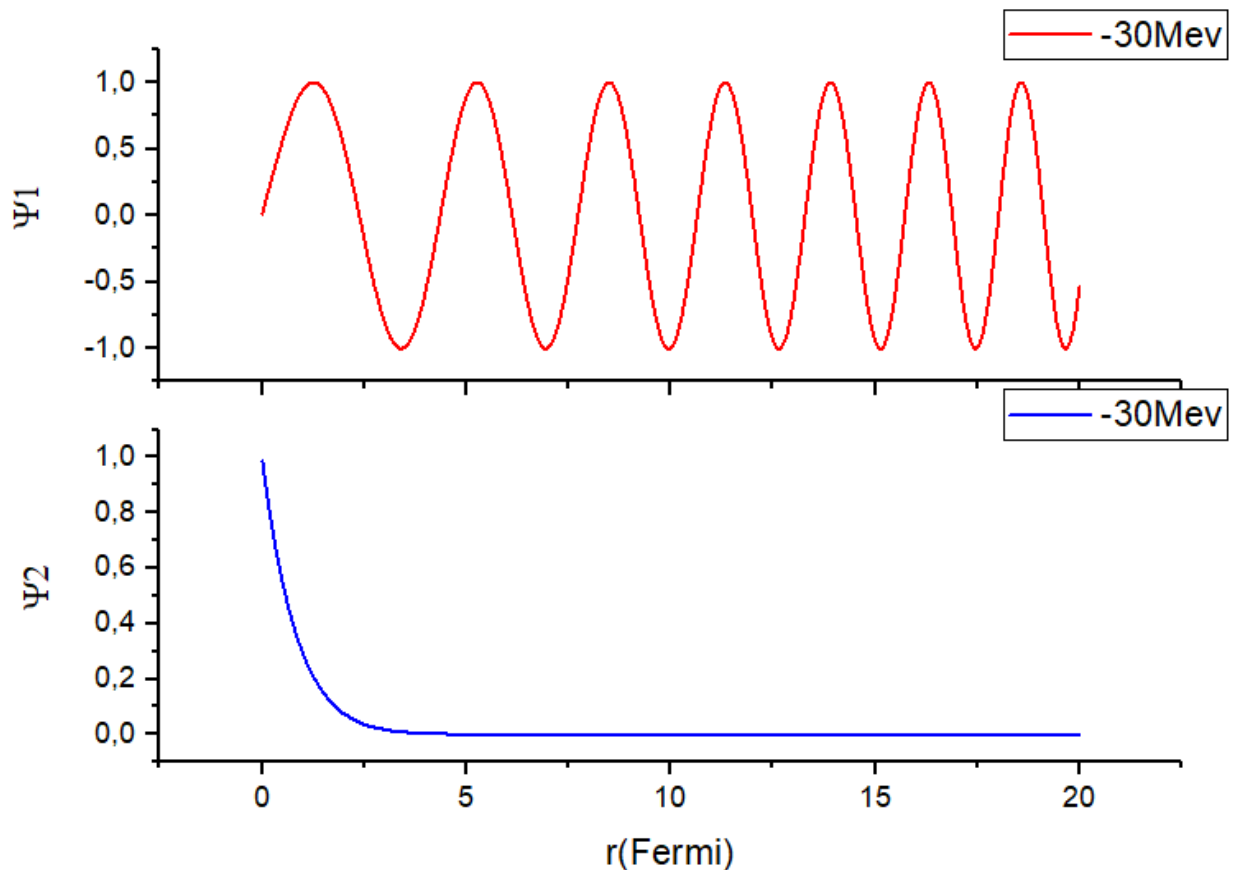


**Figure III-4 : Présentation de la fonction d'onde en fonction du rayon r**

Même interprétation est accordée pour cette courbe que celle de la courbe de la figure précédente seulement un élargissement au niveau du lobe de la première fonction ainsi qu'une atténuation au niveau de la deuxième fonction est observée.

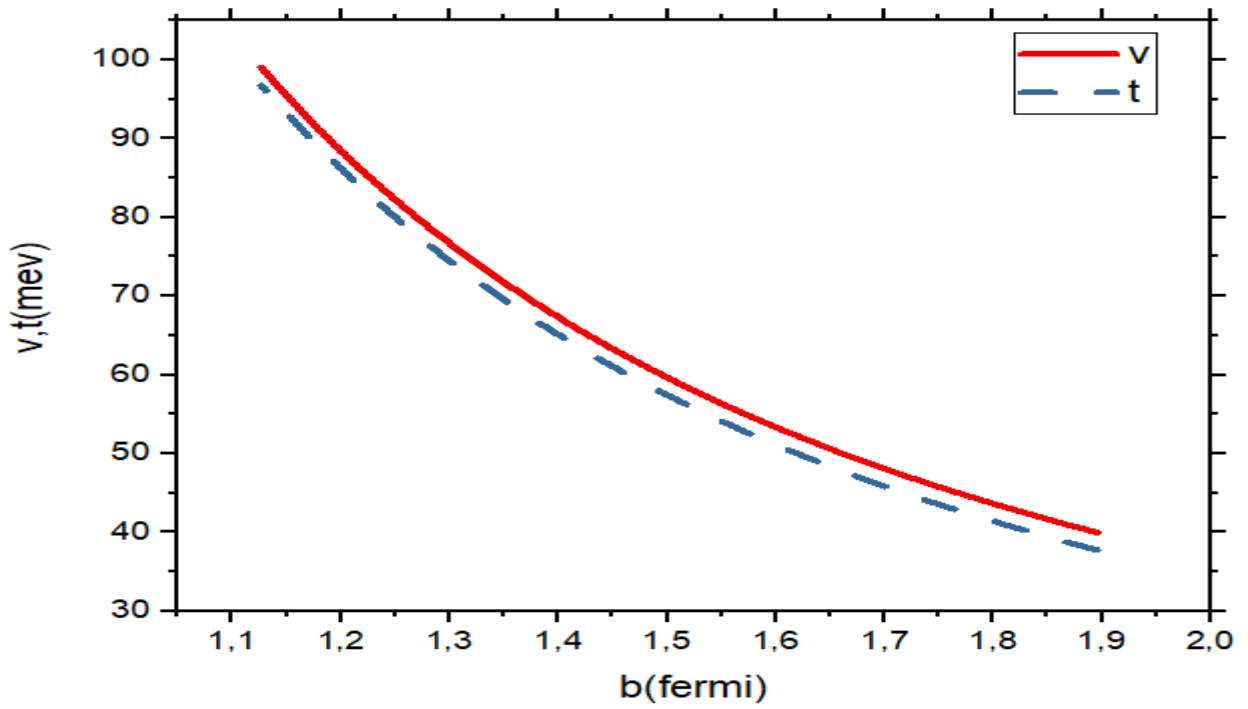


**Figure III-5 : Variation du potentiel en fonction de la largeur du puits  $b$**   
 $V_0 = 30$  ;  $T = E - V_0$

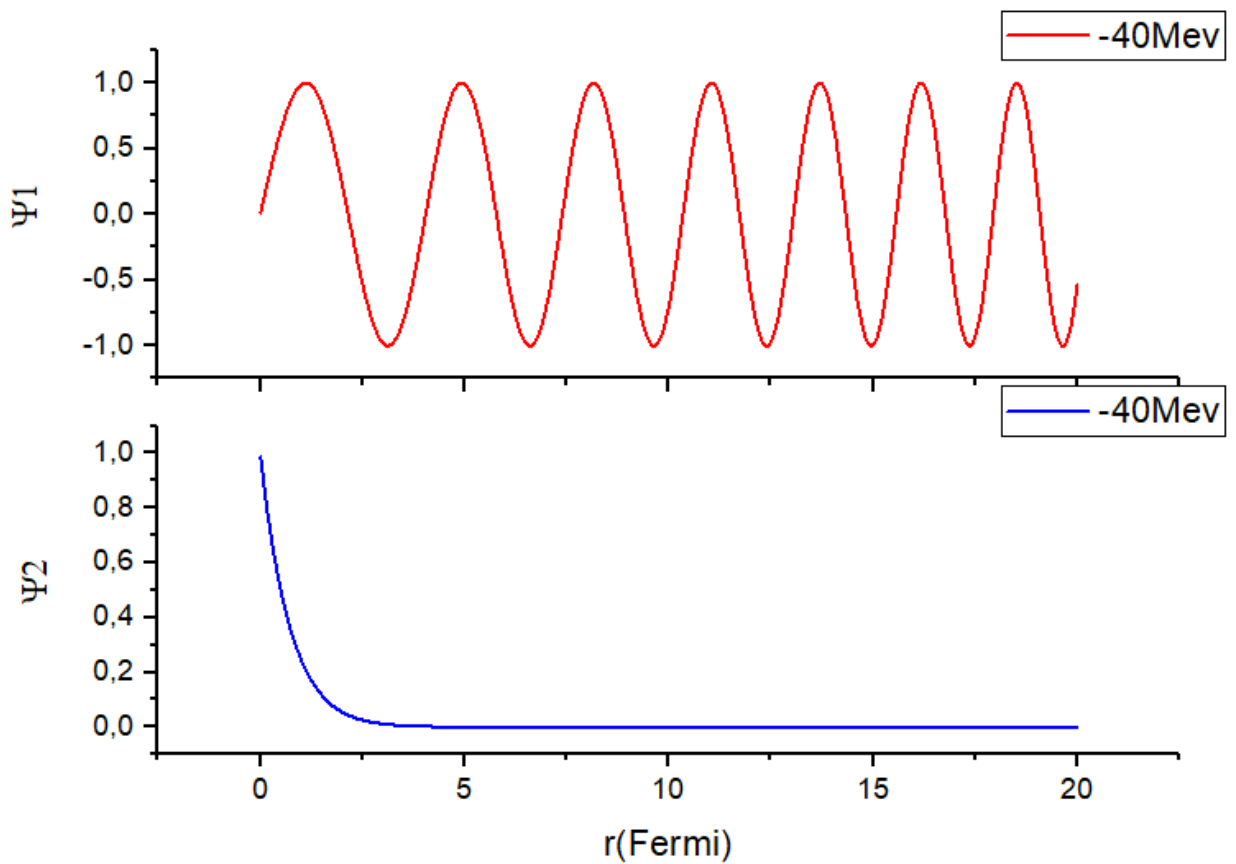


**Figure III-6 : Présentation de la fonction d'onde en fonction du rayon  $r$**

Même interprétation est accordée pour cette courbe que celle de la courbe de la figure précédente seulement un élargissement au niveau du lobe de la première fonction ainsi qu'une atténuation au niveau de la deuxième fonction est observée.



**Figure III-7 : Variation du potentiel en fonction de la largeur du puits b**  
 $V_0 = 40$  ;  $T = E - V_0$



**Figure III-8 : Présentation de la fonction d'onde en fonction du rayon r**

Même interprétation est accordée pour cette courbe que celle de la courbe de la figure précédente seulement un élargissement au niveau du lobe de la première fonction ainsi qu'une



atténuation au niveau de la deuxième fonction est observée.

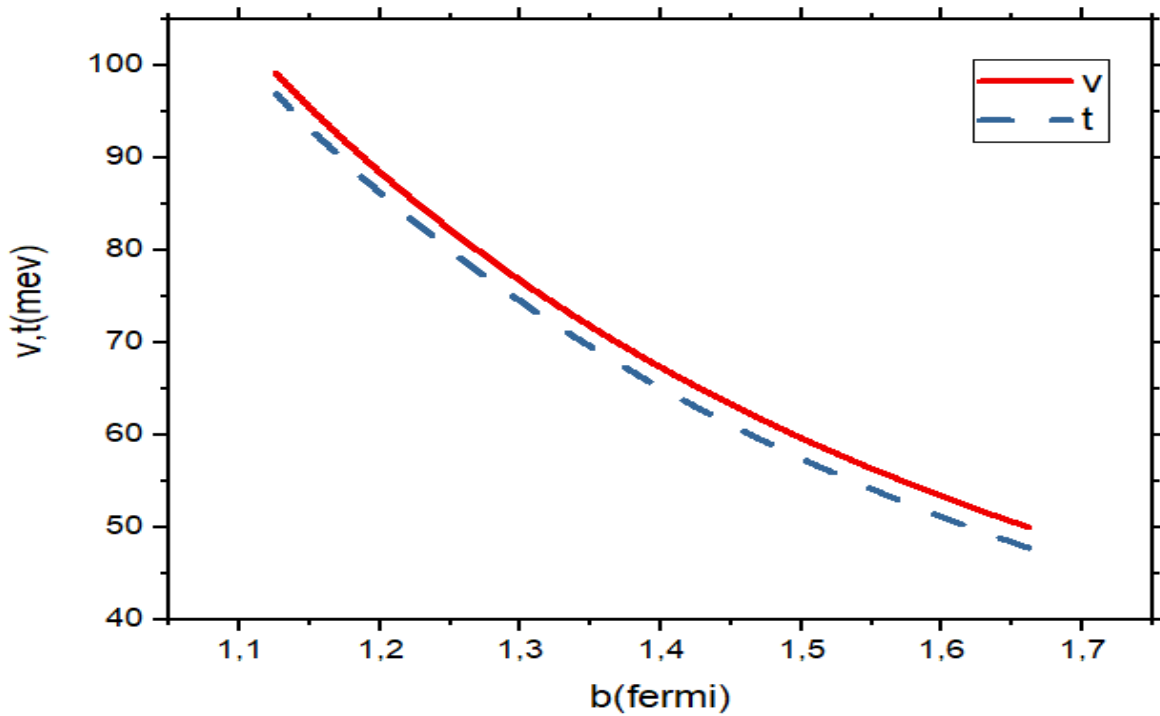


Figure III-9 : Variation du potentiel en fonction de la largeur du puits  $b$

$V_0 = 50$  ;  $T = E - V_0$

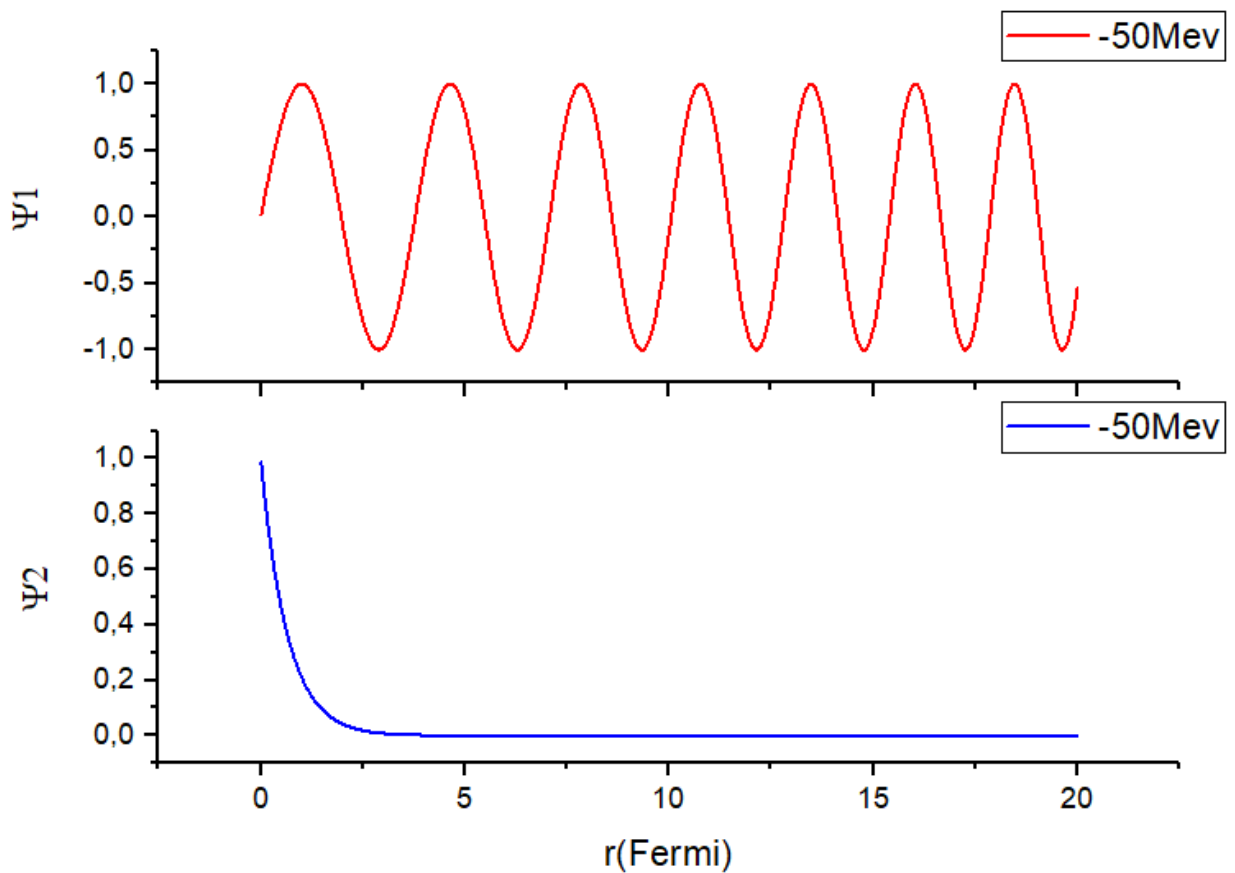
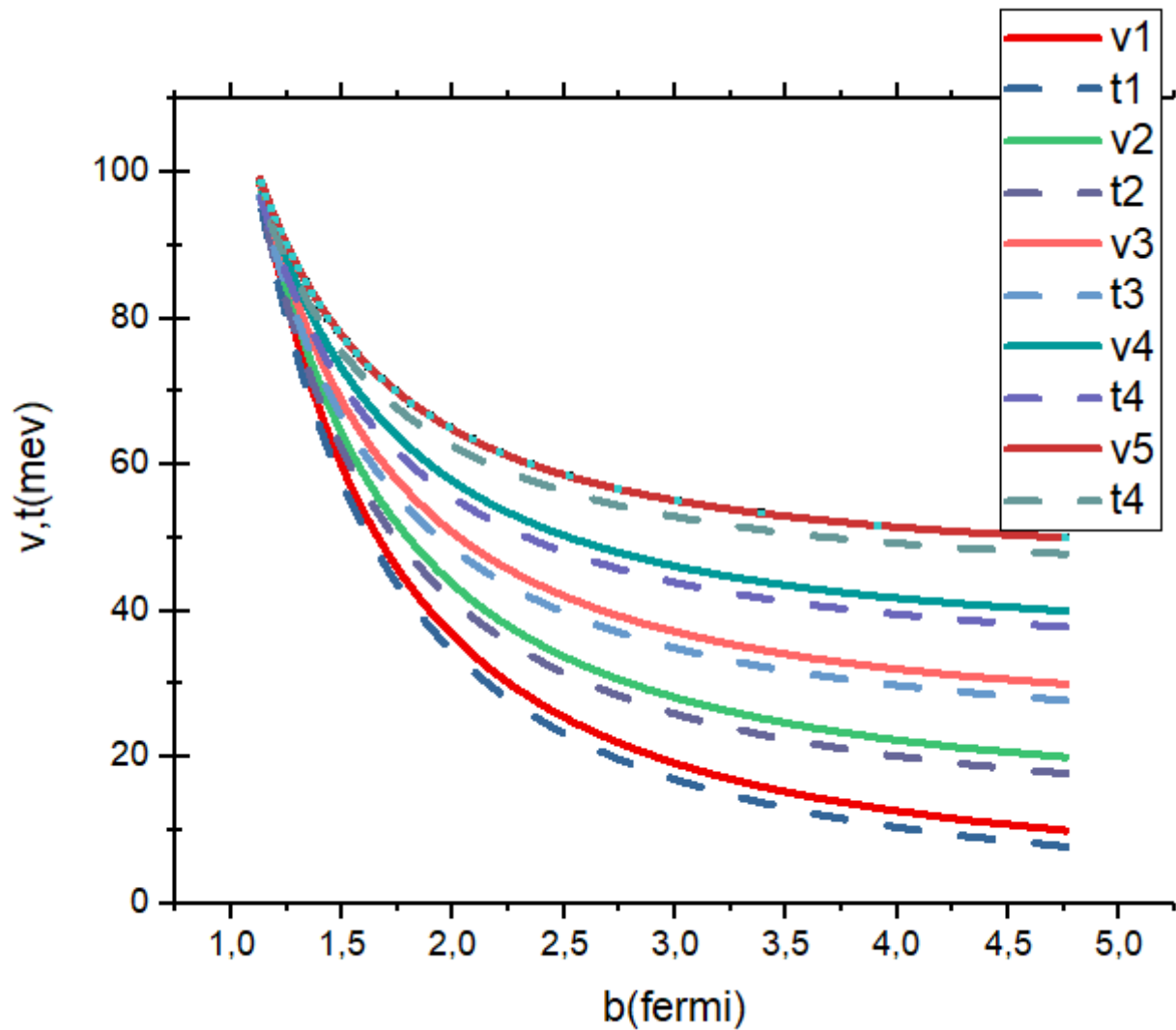


Figure III-10 : Présentation de la fonction d'onde du rayon  $r$

Même interprétation est accordée pour cette courbe que celle de la courbe de la figure précédente seulement un élargissement au niveau du lobe de la première fonction ainsi qu'une atténuation au niveau de la deuxième fonction est observée.



**Figure III-11 : Variation des différents potentiels en fonction de la largeur du puits b**

$$V_0 < V_2 < V_3 < V_4 < V_5$$

$$T_1 = E - V_1$$

$$T_2 = E - V_2$$

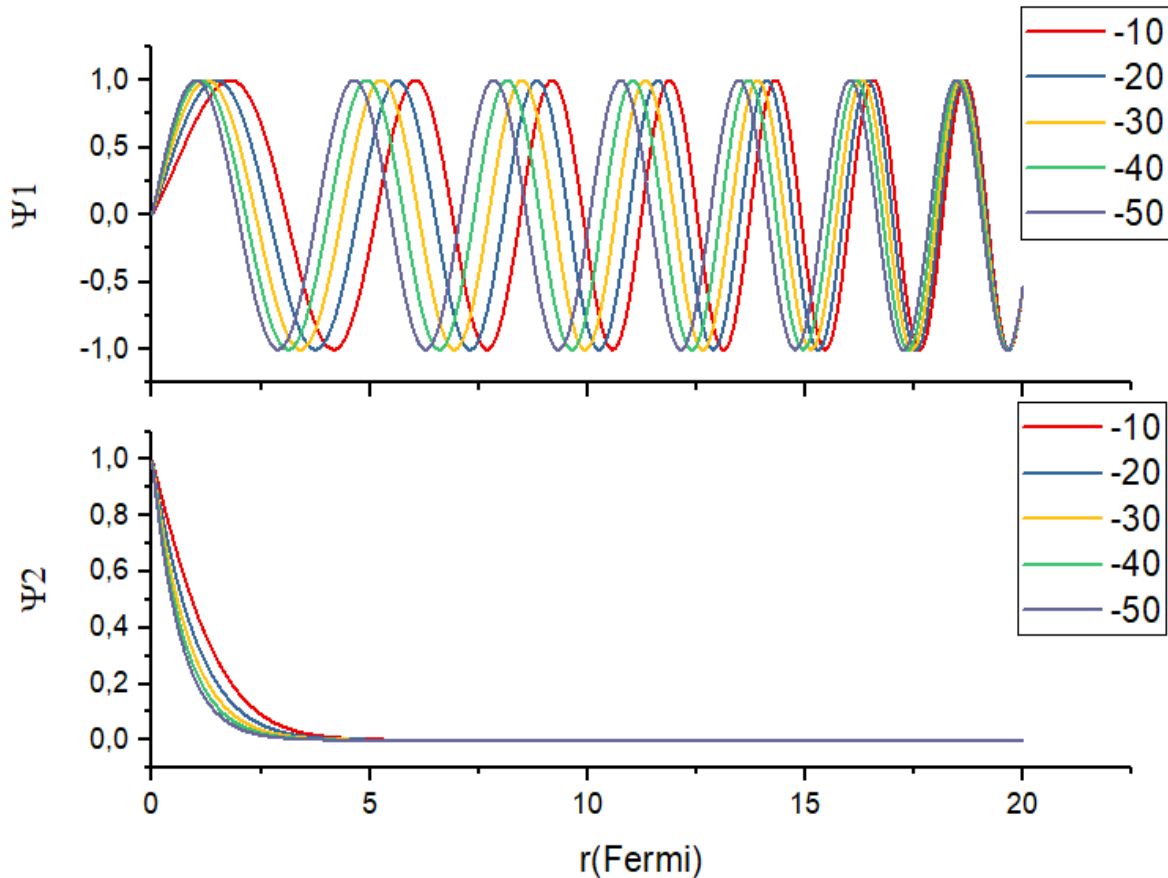
$$T_3 = E - V_3$$

$$T_4 = E - V_4$$

$$T_5 = E - V_5$$

Pour mieux comprendre ce que nous avons dit sur les figure précédentes, nous allons présenter sur une même figure toute les variations des fonctions de la région I et II respectivement. Un élargissement au niveau du lobe de la première fonction ainsi qu'une atténuation au niveau de la deuxième fonction est observée.

Alors que pour les énergies potentielles et cinétiques une augmentation est observée au fur à mesure que la largeur du potentiel augmente.



**Figure III-10 : Présentation de la fonction d'onde du rayon  $r$**

L'unité c'est MeV

Même interprétation est accordée pour cette courbe que celle de la courbe de la figure précédente seulement un élargissement au niveau du lobe de la première fonction ainsi qu'une atténuation au niveau de la deuxième fonction est observée.

### **Conclusion**

Nous avons étudié avec succès le noyau du Deutérium. Ce fameux noyau qui est formé à partir du noyau de l'hydrogène ou on lui ajoute un neutron. Bien sûr l'ajout du neutron est accompagné par une émission d'une radiation qui a comme énergie que l'énergie de A. Einstein défaut de masse.

## Référence

[1] G. Audi et A. H. Wapstra, « The 1995 update to the atomic mass evaluation », *Nuclear physics A*, vol. 595, 1995, p. 409-480.

[2] G. Audi, A. H. Wapstra., «The 1995 update to the atomic mass evaluation», dans *Nuclear Physics A*, vol. 595, 1995.

## Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons étudié avec succès le noyau du deutérium ou nous avons calculé la masse du noyau qui n'est autre que la masse de l'atome du deutérium ou on lui retranche la masse de l'électron. Nous avons déterminé l'énergie de liaison du noyau ou nous avons trouvé qu'elle est de l'ordre de  $-2.22443$  MeV une valeur qui a été aussi déterminée expérimentalement de l'ordre de  $-2.22500$  MeV et un bon accord a été signalé.

Nous avons utilisé un puits de potentiel de profondeur  $V_0$  ou nous avons résolu l'équation de Schrödinger d'une manière numérique en se basant sur la variation de la profondeur du puits ainsi que sur sa largeur  $b$ .

Nous avons présentés tous nos résultats en fonction de la largeur du puits  $b$  et la remarque qui nous a donnée une très grande vision et que au fur à mesure qu'on diminue la largeur  $b$  l'énergie augmente. Comme futur on peut étudier le deutérium pour l'état  $p$  ( $l=0$ ) ou centre de masse compense l'énergie de liaison.

## Résumé

Dans ce travail, nous nous intéresserons à étudier le noyau du deutérium. Pour cela nous avons déterminé son énergie de liaison. Sa valeur nous a conduit à le considérer comme un puits de potentiel dans lequel le neutron et le proton sont liés fortement. Alors nous affectons à la profondeur du puits de potentiel plusieurs valeurs et nous déterminons les solutions de l'équation de Schrödinger d'une manière numérique en se basant aussi sur la variation de sa largeur  $b$ .

**Mots clé :** L'équation de Schrödinger, deutérium, méthode des différences

## Abstract

In this work, we will be interested in studying the nucleus of deuterium. For this, we have determined its binding energy. Its value has led us to consider it as a potential deep in which the neutron and the proton are strongly bonded. Then we assign several values to the depth of the potential well and we determine the solutions of the Schrödinger equation numerically, also based on the variation of its width  $b$ .

**Key words:** Schrödinger's equation, deuterium, method of differences

## ملخص

في هذا العمل ، سنكون مهتمين بدراسة نواة الديوتيريوم. لهذا حددنا طاقتها الملزمة. وقد دفعتنا قيمته باعتباره بنوا محتملاً يرتبط فيه ارتباطاً وثيقاً بالنيوترون والبروتون. ثم نقوم بتعيين عدة قيم لعمق البئر المحتمل ونحدد حلول معادلة شرودنجر عددياً ، بناءً على تباين عرضها  $b$ .

**الكلمات المفتاحية:** معادلة شرودنجر ، الديوتيريوم ، طريقة الفروق.