الجمـــــهوريـــــة الجـــزائريـــــة الديـــمقراطيـــــــة الشـــعبيـــــــة
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
وزارة التعـلـيـم العـالـــي والـبـحـث الـعـلـمـي
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
جـامـعـة عمّــار ثـلـيــجــي بالأغـــواط
UNIVERSITE AMAR TELIDJI LAGHOUAT

كـلـيــــة الـعـلـــــوم
FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT Sciences de la Matière

Mémoire de Master

Domaine :Science et technique
Filière : Sciences de la matière
Option :physique Applique

Par:LAKHDARI FATNA

THEME

Formulation de la mécanique quantique dans l'espace non commutatif, application à l'atome d'hydrogène

Jury de soutenance :

Khenchoul Salah	MCB	Président
Souleh Kouider	MAA	Examinateur
Mahboub Mohamed Faouzi	MAA	Examinateur
Seffai Djamel	MAA	Rapporteur

Année Universitaire 2017- 2018

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail aux être les plus chers au monde qui m'ont Beaucoup aidé moralement et matériellement A tout ma famille sans oublier ; Ma mère et mon père   A tous les enseignants

Et tous ceux qui de près ou de loin ont participé à mon aboutissement Et tous mes amis Et toute la promotion master 2017/2018

Remerciement

En premier lieu ; je remercie le bon dieu qui m'a facilité et m'a donné la volonté et le courage afin de mener ce projet a terme.

Je tiens à remercier d'un grand profit moral et intellectuel notre encadreur monsieur **Seffai Djamel** pour son soutient, ses conseils appréciables pour l'amélioration de la qualité de ce projet.

Je tiens aussi à remercier l'administration du département **Science de la matière**

Je remercie vivement tous les professeurs qui ont donné le meilleur d'eux-mêmes afin de nous assurer une formation et un avenir digne.

Mes vifs remerciements aux membres de jury d'avoir accepté d'honorer par leur jugement notre travail.

Finalement, je tiens à exprimer mon gratitude et reconnaissance à toute personne qui à contribue de près ou de loin à l'aboutissement de ce travail

Table de matière

Chapitre IV :L’Atome d’Hydrogène dans l'espace non commutatif

Introduction

Introduction

La mécanique quantique est la science qui traite à l'échelle microscopique les phénomènes fondamentaux de la réalité avec des concepts radicalement nouveaux : quantification de l'énergie, dualité onde-corpuscule, superposition d'états, effet de l'observateur, probabilités.

La mécanique quantique est un domaine qui regroupe cinq théories et quatre formalismes mathématiques équivalents .Une première théorie quantique véritable est présentée en 1925 par Heisenberg : la mécanique des matrices. L'année suivante, Schrödinger propose une seconde théorie, la mécanique ondulatoire, fondée sur le concept de paquet d'ondes ainsi que sur le calcul différentiel et intégral. Schrödinger montre ensuite l'équivalence entre sa théorie et celle de Heisenberg. En 1927, c'est au tour de Dirac d'entrer en scène avec son formalisme mathématique des vecteurs d'états. Il démontre que son formalisme des vecteurs d'états est non seulement équivalent au formalisme des matrices de Heisenberg et à celui des fonctions d'onde de Schrödinger, mais qu'il est plus général. Ces trois premières théories, que l'on peut désigner collectivement par l'expression «mécanique quantique non relativiste » (car elles ne sont valides que pour des particules se déplaçant à des vitesses très inférieures à celle de la lumière), ou encore « mécanique quantique » tout court, sont différentes, mais équivalentes. Dans un désir de développer une physique unifiée, on cherche une mécanique quantique qui soit compatible avec les deux théories de la relativité restreinte et générale. En 1927 Oskar Klein et Walter Gordon par l'appliquer du principe de correspondance à l'expression de l'énergie d'une particule relativiste libre,$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$, ce qui conduit à une unification de la relativité restreinte et la mécanique quantique.

l'unification de la mécanique quantique et la théorie de la relativité restreinte à aboutit a la construction de la théorie quantique des champs, et les théories de jauge modernes, qui ont permis d'unifier les trois interactions fondamentales faible, forte et Electromagnétique dans le cadre du modèle standard .La physique des très hautes énergies nécessite une description cohérente d'unifier les quatre forces fondamentales. Et aussi le problème de la quantification de la gravite.

La géométrie non commutative représente un cadre mathématique prometteur qui a déjà permis d'unifier la relativité générale et le modèle standard 1] . L'étude des théories quantiques sur des espaces non commutatifs est une première étape de l'unification. Celles-ci ne sont pas simplement obtenues en réécrivant les théories commutatives sur des espaces non commutatifs

Dans le cadre de la non-commutativité, la résolution des équations les plus fondamentales est un très nécessaire pour avoir l'influence de ce dernière sur les phénomènes fondamentaux. Par exemple La situation de l'atome d'hydrogène et l'équation de Schrödinger, est plus compliquée et la plupart des modèles ne peuvent pas être résolus exactement. Et la plupart des résultats disponibles sont basés sur la théorie des perturbations.

Dans ce travail, nous présentons un modèle base sur le produit star comme une approche mathématique qui permit d'écrire la mécanique quantique dans l'espace non commutative. Notre objectif est la résolution analytique de l'équation de schrodinger pour l'atome d'hydrogène dans un espace-temps non-commutative, Nous cherchons la modification non commutative sur les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène.

Ce mémoire est organisé à quatre chapitres comme suit:

Dans le premier chapitre, on a abordé l'historique de la mécanique quantique, et on a exposé la formulation de la théorie de la mécanique quantique et les principes fondamentaux. Puis, on a écrit l'équation de Schrödinger, la fonction d'onde et la notation de Dirac. Le deuxième chapitre est consacré à la présentation de la résolution de l'équation de Schrödinger pour une potentielle centrale. Dans le troisième chapitre nous présentons l'algèbre de l'espace non commutatif, la quantification de Weyl et le produit star ; le quatrième chapitre, est réservée à la formulation de l'équation de Schrödinger dans l'espace non commutative et leur solution analytique. A la fin, nous avons présenté nos conclusions.

Chapitre I:

La mécanique quantique

1 -1Historique

1-1-1 De la mécanique classique à la mécanique quantique

Au début du 20^{e} siècle, alors qu'il devient possible de faire des expériences à l'échelle microscopique, on découvre que la physique classique ne s'applique pas. En vertu de quoi Planck doit rejeter, en1900 l'idée que la lumière est un phénomène continu et émet l'hypothèse qu'elle est émise en quanta, ou paquets d'énergie.

Cette même discrétisation de l'énergie est nécessaire, comme le découvre Einstein en1905, pour expliquer l'effet photoélectrique. Tout cela mène Einstein à postuler, en1912, la dualité onde-corpuscule: la lumière serait une onde, mais composée de corpuscules, qu'on nomme photons. Bohr présente par la suite, en1913, un nouveau modèle de l'atome dans le quel il ya une discontinuité entre les niveaux d'énergie possibles pour les électrons. Ainsi, les électrons dans un atome ne peuvent circuler que sur certaines orbites bien précises autour du noyau. Ils ne peuvent jamais se trouver entre deux orbites permises. Les électrons passent d'une orbité a l'autre parce que l'on nomme un Saut quantique [2] [3] [4].

En1924, L De Broglie va plus loin quel 'idée de Planck et d'Einstein selon la quelle les ondes lumineuses sont composées de corpuscules .Il propose que la matière elle-même

Possède une dualité onde-corpuscule il associe des ondes aux corpuscules de matière. Cette idée sera confirmée en1927 par une expérience de détraction d'électrons, la difractions étant un phénomène ondulatoire qui fut ici observé chez des particules de la matière.

Alors qu'en physique classique, la position et la vitesse d'un corps matériel fournissent une description complète des on état (si la masse et la charge électrique sont connues), les découvertes à l'échelle microscopique de la réalité demandent que l'on fasse appel à un nouveau type d'état, le spin est une grandeur physique abstraite qui n'a aucun équivalent en physique classique. La seule manière dont on peut le visualiser est en recourant à une représentation selon la quelle el spin est la rotation d'une particule sur elle-même.

1-1-2La mécanique quantique depuis 1925

La mécanique quantique est un domaine qui regroupe cinq théories et quatre formalismes mathématiques équivalents.

Une première théorie quantique véritable est présentée en1925 par Heisenberg: la mécanique des matrices. L'année suivante, Schrödinger propose une seconde théorie, la mécanique ondulatoire, fondée sur le concept de paquet d'ondes ainsi que sur le calcul différentiel et intégral .Schrödinger montre en suite l'équivalence entre sa théorie et celle de Heisenberg .En1927, c'est autour de Dirac d'entrer en scène avec son formalisme mathématique des vecteurs d'états. Il démontre que son formalisme des vecteurs d'états est non seulement équivalent au formalisme des matrices de Heisenberg et à celui des fonctions d'onde de Schrödinger, mais qu'il est plus général [2] [3] [4].

Ces trois premières théories, que l'on peut désigner collectivement par l'expression «mécanique quantique non relativiste» (car elles ne son t valides que pour des particules se déplaçant à des vitesses très inférieures à celle de la lumière), ou encore «mécanique quantique» tout court, sont différentes, mais équivalentes .Dans un désir de développer une physique unifiée, on cherche une mécanique quantique qui soit compatible avec les deux théories de la relativité, restreinte et générale.

En1928 Dirac réussit à unifier sa mécanique des vecteurs d'états avec la relativité restreinte. La mécanique quantique relativiste de Dirac a une application très limitée. Elle a cependant un grand mérite: a lors que le spin est une grandeur physique qui doit être incorporée aux trois premières théories par un postulat supplémentaire, il devient une conséquence naturelle de la mécanique quantique relativiste de Dirac. De plus, Dirac prédíten1930, à partir des a mécanique quantique relativiste, l'existence de l'antimatière.

Les antiparticules seraient des particules ordinaires d'énergie négative, c'est-à-dire des états inoccupés. Dirac dira même que l'anti électron, devant avoir une charge positive, et le proton constitue une seule et même particule. En1931, Dirac modifie sa prédiction: les antiparticules seraient des particules totalement nouvelles Les antiélectrons seraient des électrons de charge positive, mais non des protons. Cette seconde conception de l'antimatière est celle qui est aujourd'hui en vigueur. La prédiction corrigée de Dirac sera confirmée expérimentalement par Carl Anderson en1932 1933: Anderson découvre, dans le rayonnement cosmique, des traces laissées par des électrons positifs, qu'il nomme positrons. La recherche d'une théorie satisfaisante qui uni…e mécanique quantique et relativités pour suit.

En1948, une nouvelle théorie voit le jour : la théorie quantique des champs .Elle uni…e mécanique quantique et relativité restreinte et ne soufre pas des limites de la mécanique quantique relativiste de Dirac. Elles' énonce dans un nouveau formalisme mathématique, celui des intégrales de chemin de Feynman .La théorie quantique des champs continue des développer depuis 1948 et discute aujourd'hui des quatre forces fondamentales qui régissent tous les phénomènes physiques connus, soit la force gravitationnelle ,la force électromagnétique et les forces nucléaires faible et forte .Notons que ces deux dernières forces ne se manifestent qu' à l'échelle des noyaux atomiques ;mis aparté les phénomènes de la physique nucléaire, tous les phénomènes physiques connus sont régis par les forces gravitationnelle et électromagnétique. Chacune de ces quatre forces est engendrée par son propre champ. Notons qu'à ce jour, seulement trois des quatre champs sont quantifiés

Par cette théorie décrits, dans un formalisme mathématique cohérent et concordant avec les faits, comme étant composés de particules. Le seul qui fait exception est le champ gravitationnel: la théorie quantique des champs n'a pas encore réussi en produire une description quantifié cohérente et concordante.

La théorie quantique des champs, que l'on désigne aussi par l'expression physique des particules, est la théorie physique la plus général eau jour d'hui. Elle est toujours l'objet de recherches. Les physiciens sont notamment à la recherche de la «théorie du tout», qui permet trait de véritablement incorporer la gravitation à la théorie quantique des champs. Or la théorie de la gravitation la plus générale dont disposent les physiciens aujourd'hui est la relativité générale .La «quête du Saint- Graal» de la physique d'aujourd'hui est ainsi de tenter d'unifier la théorie quantique des champs et la relativité générale en une seule et unique «théorie du tout». Des solutions potentielles comprennent la théorie des cordes, la théorie des membranes et la théorie de la gravitation quantique [2] [3] [4].

1-2 Fonction d'onde :

Pour étudier une particule quelconque en mécanique quantique, il faut substituer au concept classique de trajectoire celui d'un état dépendant du temps. Ainsi l'état quantique est caractérisé par une fonction d'onde $\psi(\vec{r},t)$ qui contient toutes les informations disponibles sur la particule A et B , $\vec{r}$et t matérialisent la dépendance de la fonction d'onde vis-à-vis de la position et du temps. $\psi(\vec{r},t)$ est appelée amplitude de probabilité alors que $|\psi(\vec{r},t)|^2$ est une densité de probabilité.

1-2-1 Normalisation de la fonction d'onde :

L'interprétation probabiliste de la fonction d'onde impose une condition, appelée condition de normalisation, cette condition est fondée sur le fait que la probabilité de trouver la particule dans la totalité de l'espace vaut 1. [5] [6].
Comme nous savons que la particule doit bien se trouver quelque part sur l'axe des$x$, la normalisation de la fonction d'onde est telle que :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx|\psi(x,t)|^2 = 1 \quad (1.1)$$

Cette condition entraine naturellement que la fonction d'onde ne peut pas diverger ou rester constante à l'infini, on utilise cette nécessité pour éliminer certaines solutions mathématiques divergentes.

1-2-2Equation de Schrödinger stationnaire :

L'équation de Schrödinger pour l'évolution dans le temps de la fonction d'onde $\psi(\vec{r},t)$d'une particule repérée par son vecteur position $\vec{r}$ s'écrit [5] [6] :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = H\psi(\vec{r},t) \quad (1.2)$$

Où $\hbar$ est l'opérateur Hamiltonien de la particule et la constante de Planck. Si la particule est en interaction avec un potentiel scalaire stationnaire et en l'absence de champ magnétique, H ne dépendra pas explicitement du temps et prendra la forme simple suivante [5] ,[6] :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \nu(\vec{\mathrm{r}}) \quad (1.3)$$

Oùm est la masse de la particule, supposée constante. Δ est l'opérateur Laplacien et $\nu(\vec{\mathrm{r}})$ étant l'opérateur d'énergie potentielle associée au potentiel d'interaction. Les états physiques sont ceux qui correspondent à des solutions pour les quelles $\psi(\vec{r},t)$est normalisable sur tout l'espace de définition de$\nu(\vec{\mathrm{r}})$. Autrement dit $\psi(\vec{r},t)$appartient à l'espace de Hilbert des fonctions de carré sommable [5] ,[6]:

$$\int d\,\vec{\mathrm{r}}|\psi(\vec{\mathrm{r}},t)|^2 < \infty \quad (1.4)$$

Car $|\psi(x,t)|^2$représente la densité de probabilité de présence.

Pour résoudre une équation de type (1.2) dans le cas stationnaire, on utilise souvent la technique de séparation des variables d'espace et du temps. Ceci consiste à chercher les solutions sous la forme d'un produit d'une fonction de l'espace et d'une fonction du temps :

$$\psi(\vec{\mathrm{r}},t) = u(t)\varphi(\vec{\mathrm{r}}) \qquad (1.5)$$

En substituant (1.5) dans (1.2), on obtient après séparation :

$$\frac{i\hbar}{u(t)}\frac{du(t)}{dt} = \frac{1}{\varphi(\vec{\mathrm{r}})}H\varphi(\vec{\mathrm{r}}) \qquad (1.6)$$

Il s'agit d'une égalité entre deux expressions, dont l'une ne dépend que de l'espace et l'autre ne dépend que du temps, qui n'est satisfaite que si chaque membre est égal à la même constante [4] [5].

Ainsi, si on dénote cette constante par E ; $u(t)$ et $\varphi(\vec{r})$ seront données par [5] [6]:

$$\frac{du(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}Eu(t)(1.7)$$

dont la solution est simplement donnée par:

$$u(t) = u(0)e^{\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)}(1.8)$$

Et :

H $\varphi(\vec{r})$ =E $\varphi(\vec{r})$

L'équation (1.8) qui doit satisfaire la fonction $\varphi(\vec{r})$est une équation aux valeurs propres del'opérateur H agissant dans l'espace de Hilbert. Par conséquent les valeurs propres E de l'hamiltonien coïncident avec les énergies possibles que peut prendre la particule soumise aux interactions extérieures. Cette équation est appelée ''équation de Schrödinger stationnaire''.

Selon la forme de l'interaction, les solutions physiques peuvent être de deux natures différentes. Les solutions étendues dans l'espace, c'est-à-dire qui ne s'annulent qu'à l'infini, représentent les états de diffusion et sont associées à des énergies appartenant au spectre continu de la particule. Par contre, les solutions localisées dans l'espace, s'est-à-dire qui s'annulent à l'extérieur d'un domaine fermé et borné, représentent les états liés et correspondent à des énergies discrètes appartenant au spectre quantifié. Un système physique peut avoir uniquement des états de diffusion ou uniquement des états liés comme il peut avoir les deux à la fois.

Pour un hamiltonien de type (1.3), on peut avoir une idée sur la nature du spectre directement à partir de la forme du potentiel si ce dernier est unidimensionnel, $V(\vec{r}) \equiv V(x)$, ou central, $V(\vec{r}) \equiv V(r)$. Dans ces cas particuliers, comme en mécanique classique, l'existence d'un minimum pour le potentiel est une signature de l'existence d'états localisés et par conséquent d'un spectre quantifié dont le nombre dépend de la profondeur du minimum. Par ailleurs, on montre que dans ces cas le spectre n'est pas dégénéré, de telle sorte que chaque niveau d'énergie quantifiée lui correspond une seule fonction propre caractérisée par le nombre zéro qu'elle possède sur l'intervalle de définition du potentiel. L'énergie la plus basse lui correspond une fonction d'onde qui n'a aucun zéro et est appelée niveau fondamental, celle du premier niveau excité possède un seul zéro, et ainsi de suite. De façon générale la fonction d'onde du nième niveau excité possède exactement n zéros. Toutes les solutions ne satisfaisant pas ces conditions ne peuvent pas représenter des états physiques.

1-3Notation de Dirac :

Une des propriétés des fonctions d'onde est d'appartenir à un espace de Hilbert par exemple, pour une particule en mouvement dans l'espace, est l'espace des fonctions de carré sommable définies sur $\Re^3$. La description de l'état fournie par cette fonction d'onden'est pas unique. Une représentation équivalente de cette d'onde peut par exemple êtredonnée par sa transformée de Fourier.

Dirac a proposé une écriture équivalente aux fonctions d'onde. Il propose de décrire les états par des vecteurs d'état. A la fonction d'onde $\psi(\vec{r},t)$on associe un vecteur qu'on appelle leKet $|\psi(t)\rangle$qui appartient à un espace des états ξ isomorphe à l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$[4] ,[5]Cette notation va s'avérer très commode pour les manipulations formelles que nous aurons à faire .L'espace de Hilbert est muni d'un produit scalaire hermitien :

$$\left(\psi_1(\vec{r},t),\psi_2(\vec{r},t)\right) = \left(\psi_1(\vec{r},t),\psi_2(\vec{r},t)\right)^* \qquad (1.9)$$

dont la représentation dans l'espace des états $\mathcal{H}$ est donnée par :

$$\langle\psi_1(t)|\psi_2(t)\rangle = \langle\psi_1(t)|\psi_2(t)\rangle^* \quad (1.10)$$

La construction du premier membre $\langle\psi_1(t)|$on appelle un Bra, est analogue à celle d'un Ket $|\psi_1(t)\rangle$, en raison de l'interprétation probabiliste, les vecteurs d'état sont considérés normés [4] [5] :

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1 \quad (1.11)$$

1-4Principe d'une mesure :

Soit une grandeur physique A que l'on souhaite mesurer. Cette grandeur physique est décrite par un opérateur $\hat{A}$ agissant sur ξ. Nous considérons $|\psi\rangle$ le vecteur d'état dans lequelon souhaite mesurer la grandeur physique A. l'étude des états stationnaires solutions de l'équation de Schrödinger conduit à postuler [5] [6]:

- Chaque mesure ne peut conduire qu'à une valeur propre de l'opérateur$\hat{A}$.
- On obtient à l'aide d'un opérateur $\hat{A}$la valeur propre $a_n$avec la probabilité $P(a_n)$ suivant :

$$P(a_n) = |\langle u_n|\psi\rangle| \quad (1.12)$$

Où $|u_n\rangle$est le vecteur correspondant à la valeur propre $a_n$de l'opérateur A associé à A .On peut décomposer $|\psi\rangle$ dans le cas où $a_n$est non-dégénérée sur la base de $\{u_n\}$tel que :

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n\,|u_n\rangle \quad (1.13)$$

Si $\{u_n\}$est une base de ξ alors cet opérateur est appelé une observable.

- Si la mesure de la grandeur physique A donne le résultat a_n alors l'état du système est la projection normée de ψ sur le sous-espace propre associé à a_n :

$$\frac{|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle}} = \frac{|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle}{|\langle u_n|\psi\rangle|} \quad (1.14)$$

Définissons$\langle A\rangle$comme la moyenne des mesures d'une observable donnée.Lorsque l'on effectue la mesure d'une observable A sur un grand nombre N des systèmes identiques, la probabilité d'apparition de la valeur propre a_ns'approche de$P(a_n)$.

Notons $N(a_n)$le nombre de fois qu'on obtient la valeur propre $a_n$sur N mesures alors :

$$\lim_{N\to\infty}\frac{N(a_n)}{N}=P(a_n) \qquad (1.15)$$

Considérons la valeur moyenne $\langle A\rangle$de ces *N* expériences :

$$\langle A\rangle=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}a_nN(a_n) \qquad (1.16)$$

Grâce à l'équation (1.17) et en faisant tendre *N* vers l'infini nous pouvons déduire que

$$\langle A\rangle=\sum_n a_nP(a_n)=\sum_n a_n|\langle\psi|u_n\rangle|^2=\sum_n a_n\langle\psi|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle=\langle\psi|A(\sum_n|u_n\rangle\langle u_n|)|\psi\rangle=\langle\psi|A|\psi\rangle \qquad (1.17)$$

Au cours du calcul nous voyons apparaitre l'opérateur$\sum_n|u_n\rangle\langle u_n|$. Nous remarquons que$|u_j\rangle\langle u_j|$est l'opérateur projection sur l'état $|u_j\rangle$,$\sum_n|u_n\rangle\langle u_n|$représente donc la somme des projecteurs sur tout les vecteurs de base de notre espace de Hilbert, c'est -à-dire l'identité. Nous avons montré que la valeur moyenne des mesures d'une observable *A* d'un état $|\psi\rangle$ estdonnée par$\langle\psi|A|\psi\rangle$.On note en particulier :

- $|r_0\rangle\equiv\delta_{r_0}(r)$l'état d'une particule parfaitement localisée au pointr_0.

-$|p_0\rangle\equiv\frac{1}{(2\pi)^{2/3}}e^{ip_0r}$l'état d'une particule d'impulsion.

-$|n\rangle$ ou bien $\varphi_n(x)$les états stationnaires d'énergieE_n, où *n* est le nombre quantique.

1-5 Opérateur de densité :

Nous avons l'habitude de décrire un état par son vecteur: $|\psi\rangle=\sum_n c_n|u_n\rangle$ .Les $\{u_n\}$forment alors une base orthonormée de l'espace des états. $\sum_n|c_n|^2=1$, car on considère que $|\psi\rangle$est normé. En définissant une observable de matrice *A* par les éléments

$\langle u_p|A|u_n\rangle=A_{np}$, sa valeur moyenne $\langle A\rangle$est donnée par [5] [6]:

$$\langle A\rangle=\langle\psi|A|\psi\rangle=\sum_{n,p}c_n^*c_pA_{np} \qquad (1.18)$$

On remarque cependant que$\langle u_p|\psi\rangle\langle\psi|u_n\rangle=c_n^*c_p$. Il est donc naturel d'introduire la quantité

$$\boldsymbol{\rho}=|\boldsymbol{\psi}\rangle\langle\boldsymbol{\psi}| \qquad (1.19)$$

Comme opérateur densité. Ainsi l'opérateur densité est représenté dans la base orthonormée $\{u_n\}$ par une matrice dite de « densité » dont les éléments sont

$$\rho_{np} = \langle u_p|\rho|u_n\rangle \quad (1.20)$$

Il est possible de déduire les propriétés suivantes sur la trace de cet opérateur densité

$$\sum_n |c_n|^2 = \sum_n \rho_{np} = TR\rho = 1 \quad (1.21)$$

A partir des équations (1.20) et (1.21) d'une part, et de la définition des éléments A_{np}de lamatrice *A* d'autre part, on peut obtenir :

$$\langle A\rangle = \sum_{n,p}\langle u_p|\rho|u_n\rangle\langle u_p|A|u_n\rangle = \sum_p\langle u_p|\rho A|u_n\rangle = TR\rho A \quad (1.22)$$

La probabilité *P a* (*n*) des différents résultats que peut donner la mesure de l'observable *A, en* notant *u u P n nn*= et en utilisant (1.18) et (1.22) est donnée par :

$$P(a_n) = |\langle\psi|u_n\rangle|^2 = \langle\psi|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle = \langle\psi|P_n|\psi\rangle = TRP_{n\rho} \quad (1.23)$$

Cette expression de $P(a_n)$ nous renseigne sur la manière d'utiliser l'opérateur densité pour des mesures d'observable.

1-6 Postulats de la mécanique quantique :

1-6-1Enoncé des postulats :

En mécanique quantique, l'état d'une particule est complètement spécifié par deux variables dynamiques [5] ,[6]la position $r(t)$et l'impulsion$p(t)$, toutes les autres quantités physiques (énergie, moment cinétique…….) peuvent être obtenues de ces variables dynamiques ; de même, connaissant l'état du système au temps $t = t_0$ Les équations dumouvement :

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p}, \dot{p} - \frac{\partial H}{\partial r} \quad (1.24)$$

Permettent de déterminer complètement l'état du système en tout autre temps.

1-6-2Description de l'état d'un système : Postulat 01 :

A chaque système physique est associé un espace de Hilbert, l'état du système est défini à chaque instant par un vecteur normé $\psi(t)$ de $\mathcal{H}$[5] ,[6]

1-6-3 Description des grandeurs physiques : Postulat 02 :

A toute grandeur physique$A$ est associé un opérateur hermétique $\hat{A}$ de : $\hat{A}$estl'observable représentant la grandeur A[5] ,[6]

1-6-4Mesure des grandeurs physiques : Postulat 03 :

Soit $|\psi\rangle$ l'état dans lequel se trouve le système au moment où la mesure de$A$ est effectuée, quel que soit $|\psi\rangle$, les seuls résultats possibles sont les valeurs propres $a_n$de A[5] [6]].

1-6-5Résultat de mesure des grandeurs: Postulat 04 :

Notons$p_n$le projecteur sur le sous-espace associé à la valeur propre a_n(supposé discrète), la probabilité de trouver la valeur $a_n$lors d'une mesure de est[5] ,[6]:

$$\wp(a_n) = |p_n|\psi\rangle|^2 \tag{1.24}$$

Dans le cas d'une valeur propre discrète et non dégénérée, le projecteur est simplement :

$$p_n = |n\rangle\langle n| \text{Où :} A_n = a_n|n\rangle \tag{1.25}$$

La probabilité peut donc s'écrire :

$$\wp(a_n) = |\langle n|\psi\rangle|^2 \tag{1.26}$$

Si le degré de dégénérescence $g_n$est supérieur à 1, le projecteur sur le sous-espace propre associé à la valeur propre $a_n$est:

$$\wp(a_n) = \sum_i^{g_n} |n_i\rangle\langle n_i| \tag{1.27}$$

Et la probabilité s'exprime comme :

$$\wp(a_n) = \langle\psi|p_n|\psi\rangle = \sum_i^{g_n} |\langle n_i|\psi\rangle|^2 \tag{1.28}$$

Dans le cas d'une quantité physique à spectre continu (la position, l'impulsion, par exemple) la seule prédiction que l'on peut faire correspond à un résultat situé dans une plage de valeurs, la probabilité d'obtenir un résultat compris entre a_α et $a_\alpha + da_\alpha$est[4] ,[5].$\wp(a_\alpha)da_\alpha = \langle\psi|p_\alpha|\psi\rangle da_\alpha$ (1.29)

1-6-6Réduction du paquet d'onde : Postulat 05 :

Immédiatement après une mesure de la grandeur physique$A$ ayant donné le résultat a_n pour un système décrit par $|\psi\rangle$, l'état du système $|\acute{\psi}\rangle$ donné par la projection normée de $|\psi\rangle$sur le sous-espace propre associe à $a_n$est:[4] ,[5] :

$$|\acute{\boldsymbol{\psi}}\rangle = \frac{\mathbf{p_n}|\boldsymbol{\psi}\rangle}{\sqrt{\langle\boldsymbol{\psi}|\mathbf{p_n}|\boldsymbol{\psi}\rangle}} \tag{1.30}$$

1-6-7 Evolution dans le temps :

Postulat 06 :

L'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ est régie par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \tag{1.31}$$

Où $H(t)$est l'observable associée à l'énergie totale du système, également appelée Hamiltonien du système [5] [6]

Chapitre II:

Solution de l’équation de Schrödinger pour un potentiel coulombienne

2. 1 Solution d'équation de Schrödinger

Dans la théorie quantique de l'atome d'hydrogène, nous insistons particulièrement sur la symétrie sphérique du système qui est composé d'un noyau à un proton et d'un électron Tourner autour du noyau à une distance r. Le système complet est décrit par trois variables r, θ et φ mais il est aussi paramétré par les trois nombre quantique : principal n, azimutal l et magnétique m. Cette théorie montre qu'il est possible de séparer le problème en une partie purement radiale $R_{n,l}(r)$, qui dépend uniquement de la distance r entre le centre de gravité du noyau et celui de l'électron et qui est paramétrée par les deux seules nombres quantiques n et l, et une autre partie purement angulaire qui est totalement exprimée par les fonctions harmoniques sphériques $y_l^m(\theta, \varphi)$.

Le modèle quantique de l'atome d'hydrogène, est décrit par l'équation de Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\Psi(r) = E\Psi(r) \tag{1.32}$$

Où $V(r)$ est Le potentiel entre le proton et l'électron est donné par le potentiel coulombien, avec r est la distance entre le proton et l'électron.

Dans ce système de coordonnées sphériques, le laplacien s'écrit [7] [8]:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \left[\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\frac{1}{r^2} \tag{1.33}$$

Faisons une première séparation des variables :

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \tag{1.34}$$

Et appelons

$$\Lambda^2 = \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \tag{1.35}$$

de sorte que

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\Lambda^2 \tag{1.36}$$

La séparation des variables donne :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}\right]\mathrm{Y}(\theta,\varphi)-\frac{\hbar^2}{2m}R(r)\Lambda^2\mathrm{Y}(\theta,\varphi)+\mathrm{V(r)}R(r)\mathrm{Y}(\theta,\varphi)$$
$$=\mathrm{E}R(r)\mathrm{Y}(\theta,\varphi) \qquad (1.37)$$

Avec

$$\Lambda^2\mathrm{Y}(\theta,\varphi)=-\ell(\ell+1)\mathrm{Y}(\theta,\varphi)$$

On a,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2R(r)r}{dr^2}+R(r)r\left[\mathrm{V(r)}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\ell(\ell+1)\right]=\mathrm{E}R(r)r \qquad (1.38)$$

2 2Calcul les Harmoniques Sphériques

Cherchons maintenant les fonctions propres communes à $\hat{L}^2$et $\hat{L}_Z$de valeurs propres respectives $\hbar^2\ell(\ell+1)$et $\hbar m$, Pour calculer $\mathrm{Y}(\theta,\varphi)$, faisons la séparation des variables suivante [7] [8][9]:

$$\mathrm{Y}(\theta,\varphi)=\mathrm{T}(\theta)\mathrm{P}(\varphi) \qquad (1.39)$$

Nous avons alors

$$\frac{\mathrm{T}}{\sin^2\theta}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{P}}{\mathrm{d}\varphi^2}+\frac{\mathrm{P}}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{dT}}{\mathrm{d}\theta}\right)=-\ell(\ell+1)\mathrm{TP}(1.40)$$

Ce qui donne [5] [3]

$$\frac{1}{\mathrm{P}}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{P}}{\mathrm{d}\varphi^2}=-\mathrm{m}^2$$

$$\frac{\sin\theta}{\mathrm{T}}\frac{\mathrm{dT}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{dT}}{\mathrm{d}\theta}\right)+\ell(\ell+1)\sin^2\theta=\mathrm{m}^2 \qquad (1.41)$$

La résolution des équations pour *T* et *P* imposeront des conditions sur *m* et *l*.

$$\mathrm{P}(\varphi)=\mathrm{e}^{\mathrm{im}\varphi} \qquad (1.42)$$

La condition de périodicité sur φ impose que *m* soit entier

L'équation en θ est plus compliquée. Sans démonstration, nous dirons que la solution est donnée par les polynômes de Legendre, avec les conditions [7] [8][9]:

$l = 0; 1; 2; ...$

$m= l; l - 1; ... ; -l + 1; -l$

D'après ce qui précède, on peut les chercher sous la forme [7] [8][9]:

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = F_\ell^m(\theta)e^{im\varphi} \tag{1.43}$$

Les harmoniques sphériques sont des fonctions propres d'opérateurs hermétiques .Elles sont donc orthogonales [5] [3]:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta\, (Y_\ell^m) \dagger (\theta,\varphi) Y_{\acute{l}}^{\acute{m}}(\theta,\varphi) = \delta_{l,\acute{l}}\delta_{m,\acute{m}} \tag{1.44}$$

La dépendance en des harmoniques sphériques est reliée à des fonctions particulières appelées polynômes et fonctions de Legendre.

On peut établir l'expression générale suivante [5] [3]**:**

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}}\, e^{im\varphi}(\sin\theta)^{-m}\frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}}\sin\theta^{2l} \tag{1.45}$$

On a particulier [5] [3] :

$$Y_\ell^{-m}(\theta,\varphi) = (-1)^m (Y_\ell^m(\theta,\varphi))^* \tag{1.46}$$

2 3 Calcul les fonctions radiales :

Dans ce chapitre nous exprimons la relation générale donnant ces fonctions radiales

$R_{n,l}(r)$, qui nous permettent de connaître les densités de probabilités correspondantes à l'aide de la relation suivante:[7] [8][9]:

$$R(r) = \frac{1}{r}u(r)$$

$$\frac{dR}{dr} = -\frac{1}{r^2}u(r) + \frac{1}{r}\frac{du}{dr}$$

$$\frac{d^2\mathrm{R}}{d\mathrm{r}^2} = \frac{1}{\mathrm{r}^3}\mathrm{u(r)} - \frac{2}{\mathrm{r}^2}\frac{\mathrm{du}}{\mathrm{dr}} + \frac{1}{\mathrm{r}}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{u}}{\mathrm{dr}^2}$$

L'équation(1.38) devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{u}}{\mathrm{dr}^2} + \left[\frac{-\mathrm{e}^2}{4\pi\varepsilon_0 \mathrm{r}} + \frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{1}{\mathrm{r}}\ell(\ell+1)\right]\mathrm{u} = \mathrm{Eu} \qquad (1.47)$$

Dans le cas particulier du potentiel coulombien d'interaction entre un noyau de charge $+\mathrm{Ze}$ et un électron en charge $-\mathrm{e}$, $V(\mathrm{r}) = -\frac{\mathrm{Ze}^2}{\mathrm{r}}$ Posons $\propto = \mathrm{Ze}^2 \Rightarrow V(\mathrm{r}) = -\frac{\propto}{\mathrm{r}}$ Si

$l \neq 0$ Pour r petit, on peut négliger $-\frac{\propto}{\mathrm{r}}$ devant $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m\mathrm{r}^2}$ *d'où :*

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dr}^2}u(\mathrm{r}) \approx \frac{l(l+1)}{\mathrm{r}^2}u(\mathrm{r})$$

Supposons que $\mathrm{u(r)}$ soit de la forme r^{s} :

$\Rightarrow \mathrm{S(s-1)}r^{s-2} = l(l+1)r^{s-2}$

$\Rightarrow \mathrm{S(s-1)} = l(l+1)$ (1.48)

$\Rightarrow \mathrm{S} = \mathrm{l} + 1$

Où : $\mathrm{S} = -l$

Mais la condition de normalisation sur R(r) impose que $\int_0^\infty \mathrm{r}^2\,\mathrm{R}^2(\mathrm{r})\mathrm{dr}$ soit convergent C'est-à-dire que $\int_0^\infty u^2(\mathrm{r})\,dr$ soit convergente. Il faut donc choisir la solution positive $\mathrm{s} = \mathrm{l} + 1$.

Si $\mathrm{l} = 0$, on obtient après de l'origine (r = 0) :

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dr}^2}u(\mathrm{r}) \propto -\frac{u(\mathrm{r})}{\mathrm{r}}$$

Si: $u(\mathrm{r}) = a_0 + a_1\mathrm{r} + \mathrm{a}_2\mathrm{r}^2 + \cdots$ (1.49)

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dr}^2}u(\mathrm{r}) = 2\mathrm{a}_2 + \ \ldots$$

Ce qui impose $a_0 = 0$

On doit avoir pour r petit $u(\mathrm{r})\alpha\ r^{l+1}$

Faisons le changement de variables

$\lambda = \sqrt{-\frac{\mathrm{E}}{\mathrm{E}_1}}$,$\rho = \frac{\mathrm{r}}{\mathrm{a}_0}$avec :$E_1 = \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$, $a_0 = \frac{\hbar^2}{m\alpha}$

L'équation (1.38)devient :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{1}{\mathrm{a_0}^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{\hbar^2 \mathrm{l}(\mathrm{l}+1)}{2\mathrm{ma_0}^2\rho^2} - \frac{\propto}{\mathrm{a}_0\rho}\right]\mathrm{u}(\rho) = \mathrm{E}_1\lambda^2\mathrm{u}(\rho)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{\hbar^2 \mathrm{l}(\mathrm{l}+1)}{2\mathrm{ma_0}^2\rho^2}6\frac{2\mathrm{ma_0}^2}{\hbar^2} + \frac{2\mathrm{ma_0}^2 \propto}{\mathrm{a}_0\rho}\mathrm{u}(\rho) = \frac{2\mathrm{mE_1a_0}^2}{\hbar^2}\lambda^2\mathrm{u}(\rho)$$

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{\mathrm{l}(\mathrm{l}+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho}\right]\mathrm{u}(\rho) = \frac{2\mathrm{m}^2 \propto^2}{2\hbar^4}\frac{\mathrm{h}^4}{\mathrm{m}^2 \propto^2}\lambda^2\mathrm{u}(\rho) \quad (1.50)$$

Soit :

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{\mathrm{l}(\mathrm{l}+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho}\right]\mathrm{u}(\rho) = 0$$

Quand $\rho \to +\infty$, on a approximativement[7] [8][9]:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} \approx \lambda^2 u \Rightarrow u(\rho) \approx e^{\pm\lambda\rho} \quad (1.51)$$

La condition de normalisation impose de rejeter la solution $e^{+\lambda\rho}$.

Cherchons donc la solution sous la forme $(\rho) \simeq e^{-\lambda\rho}y(\rho)$

$$\frac{du}{d\rho} = -\lambda e^{-\lambda\rho} + e^{-\lambda\rho}Y''$$

$$\frac{d^2u}{d\rho^2}=\lambda^2 e^{-\lambda\rho}y - 2\lambda e^{-\lambda\rho}\acute{Y}+e^{-\lambda\rho}Y'' \quad (1.52)$$

$$\Rightarrow \left[\frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda\frac{d}{d\rho} + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]y(\rho) = 0$$

Cherchons la solution sous la forme d'un développement en série:

$$y(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{q=0}^{\infty} C_b \rho^q = \sum_{q=0}^{\infty} C_b \rho^{q+l+1} \tag{1.53}$$

En dérivant par rapport à ρ on aura :

$$\frac{dy}{d\rho} = \sum_{q=0}^{\infty} C_q(q+l+1)\rho^{q+l}$$

$$\frac{d^2y}{d\rho^2} = \sum_{q=0}^{\infty} C_q(q+l+1)(q+l)\rho^{q+l-1}$$

$$\Rightarrow \sum_{q=0}^{\infty} C_q(q+l+1)(q+l)\rho^{q+l-1} - 2C_q(q+l+1)\rho^{q+l} + 2C_q\rho^{q+l}$$

$$-C_q l(l+1)\rho^{q+l}\rho^{q+l-1} = 0 \tag{1.54}$$

$$\Rightarrow C_0(l+1)l\rho^{l-1} - C_0(l+1)\, l\rho^{l-1} = 0$$

$$\Rightarrow C_0(q+l+1)\,(q+l) - 2ƛC_{q-1}(q+l) + 2C_{q-1} - C_q l(l+1) = 0$$

Soit :

$$C_q(q+l+1)(l+1) - l(l+1) = 2C_{q-1}(ƛ(q+l)-1)$$

Que l'on peut réécrire sous la forme suivante :

$$C_q q(q+2l+1) = 2C_{q-1}(ƛ(q+l)-1)$$

$$\Rightarrow C_q = C_{q-1}\frac{2(ƛ(q+l)-1)}{q(q+2l+1)} \tag{1.55}$$

Quand $q \longrightarrow \infty$.

$$C_q \propto C_{q-1}\frac{2ƛ}{q}$$

$$\Rightarrow C_q \propto \frac{1}{q!}2ƛ(1.56)$$

$\Rightarrow y(\rho) \approx \rho^{l+1} e^{2ƛ\rho}$

$\Rightarrow u(\rho) \propto e^{ƛ\rho}$

Qui n'est autre que la solution rejetée précédemment. Il faut donc que le numérateur s'annule, autrement dit qu'il existe un entier n=q≥ 1 tel que

ƛ (q+l)-1=0

$$\Rightarrow ƛ = \frac{1}{n+l} \qquad (1.57)$$

Les énergies possibles sont données par [5] [3] :

$$E_{n,l} = -\frac{E_l}{(n+l)^2)} \qquad n=1\ldots \qquad (1.58)$$

Les solutions $Y_{k,l}(\rho)$s'obtiennent à partir de la relation de récurrence sur les C_q:

Exemples :

1. $n = 1$,$l = 0$ $ƛ = 1$,$c_1 = 0$

$$\Rightarrow u_{1,0}(\rho) = c_0 \rho e^{-\rho} \qquad (1.59)$$

2. n=1, l=1 $ƛ = \frac{1}{2}$,$c_1 = 0$

$$\Rightarrow u_{1,1}(\rho) = c_0 \rho^2 e^{\frac{-\rho}{2}} \qquad (1.60)$$

3. n=2 , l=0 $ƛ=\frac{1}{2}$,$c_1 = -\frac{1}{2}$Co

$$\Rightarrow u_{2,0}(\rho) = c_0 \rho (1 - \frac{\rho}{2}) e^{\frac{-\rho}{2}} \qquad (1.61)$$

Finalement, les fonctions radiales s'obtiennent en remplaçant ρ par $\frac{r}{a_0}$, en divisant parr et en normalisant le résultat par la condition [7] [8][9]:

$$\int_0^{\infty} r^2 R^2 d(r) = 1 \qquad (1.62)$$

2 4 Application à l'atome Hydrogène :

2 4 1 fonctions d onde :

Les fonctions radiales sont données par [10]:

$$R_{n,l}(\mathrm{r}) = \frac{1}{\mathrm{r}} e^{\frac{-\mathrm{r}}{na_0}} \sum_{\upsilon=0}^{K-1} (-)^{\upsilon} (\frac{2}{n+l})^{\upsilon} \frac{(n-l)!\,(2l+1)!}{(n-l-1)!\,\upsilon!\,(\upsilon+2l+1)!} \left(\frac{\mathrm{r}}{a_0}\right)^{\upsilon} b_0 \qquad (1.63)$$

c_0 est déterminé par la condition de normalisation:

$$\int_0^{\infty} \mathrm{r}^2 \,(R_{k,l}\,(r))^2 = 1 \qquad (1.64)$$

Pour le premier niveau [10]:

n=1 l=0

$$\Rightarrow R_{1,0}(\mathrm{r}) = \frac{b_0}{a_0} e^{\frac{-\mathrm{r}}{a_0}} \qquad (1.65)$$

Pour le deuxième niveau :

$n = 2\,, l = 0$

$$\Rightarrow R_{2,0}(\mathrm{r}) = \frac{b_0}{a_0}\left(1 - \frac{\mathrm{r}}{2a_0}\right) e^{\frac{-\mathrm{r}}{2a_0}}$$

n=2 l=1

$$\Rightarrow R_{2,1}(\mathrm{r}) = \frac{b_0}{{a_0}^2} r e^{\frac{-r}{2a_0}} \qquad (1.66)$$

Pour le troisième niveau [6] :

$n = 3 \;\; l = 0$

$$\Rightarrow R_{3,0}(\mathrm{r}) = \frac{b_0}{a_0}\left[1 - \frac{2r}{3a} + \frac{1}{6}\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2\right] e^{\frac{-r}{3a_0}}$$

$n = 3 \;\; l = 1$

$$\Rightarrow R_{3,1}(\mathrm{r}) = \frac{b_0}{{a_0}^2} r \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right) \qquad (1.67)$$

$n = 3 \;\; l = 2$

$$\Rightarrow R_{3,2}(\mathrm{r}) = \frac{b_0}{a^3} r e^{\frac{-r}{3a}}$$

2 5 calculs L'énergie :

On calcul les dérivées [10]:

$$\frac{dR_{n,l}(r)}{dr} = \frac{A}{a_0}\ \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{\frac{-r}{2a}} \frac{d^2R_{n,l}(r)}{dr^2} = \frac{A}{{a_0}^2}\ \left(1 - \frac{r}{4a_0}\right) e^{\frac{-r}{2a_0}} \tag{1.68}$$

En reportant dans l équation radiale, on trouvé :

$$\left[-\frac{2}{a_0} + \frac{2\mu}{\hbar^2} q^2\right] + [(2 - l(l+1)]\frac{1}{r} + \left[\frac{1}{4{a_0}^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E_n\right] r = 0 \tag{1.69}$$

Cette équation est Vérifiée pour toute Valeur de r Si :

$$-\frac{2}{a_0} + \frac{2\mu}{\hbar^2} q^2 = 0 \quad 2 - l(l+1) = 0 \quad \frac{1}{4{a_0}^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E_n = 0 \tag{1.70}$$

On déduit :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu q^2}\ ,\ E_n = -\frac{1}{4}\frac{\mu q^4}{2\hbar^2} \qquad \text{Pour } l = 1 \tag{1.71}$$

On calcul les dérivées :

$$\frac{dR_{n,l}(r)}{dr} = \frac{B}{2a_0}\left(2 + \frac{r}{2a_0}\right) e^{\frac{-r}{2a}} \frac{d^2R_{n,l}(r)}{dr^2} = \frac{B}{4{a_0}^2}\left(3 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{\frac{-r}{2a_0}} \tag{1.72}$$

En reportant dans l équation rada$_0$iale, on trouvé:

$$\left[\frac{5}{4a^2} + \frac{2\mu E_n}{\hbar^2} + \frac{\mu q^2}{\hbar^2 a}\right] - \left[\frac{1}{8a^3} + \frac{\mu E_n}{\hbar^2 a_0}\right] r + \left[-\frac{2}{a} + \frac{2\mu q^2}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{2a}\right]\frac{1}{r} - [l(l+1)]\,\frac{1}{r^2} = 0 \tag{1.73}$$

Cette équation est Vérifiée pour toute Valeur de r Si :

$$\frac{5}{4{a_0}^2} + \frac{2\mu E_n}{\hbar^2} + \frac{\mu q^2}{\hbar^2 a} = 0\ ,\ \frac{1}{8{a_0}^3} + \frac{\mu E_n}{\hbar^2 a_0} = 0\ ,\ -\frac{2}{a_0} + \frac{2\mu q^2}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{2a_0} = 0 \tag{1.74}$$

On déduit :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu q^2}\ ,\ E_n = -\frac{1}{4}\frac{\mu q^4}{2\hbar^2}$$

Pour $l = 0$ (1.75)

Chapitre III :

Formulation de la mécanique quantique dans l'espace non commutatif

3.1. La quantification de Weyl

La quantification de Weyl est une technique utilisée pour décrive la mécanique quantique à partir de l'espace de phase de la mécanique classique. C'est une prescription qui nous permet d'associer un opérateur quantique à une fonction classique qui dépend des variables de l'espace de phase (variables canoniques). Soit $f\ (x)$ une fonction quelconque définie sur un espace (vectoriel) euclidien à D dimensions$\mathfrak{R}^D$. On définit la transformée $\tilde{f}(x)$de $f\ (x)$ par la relation [11] :

$$\tilde{f}(k) = \int d^D x e^{-ik_i x^i} f(x) \tag{1.76}$$

Remarque que si $f(x)$est une fonction réelle alors

$$\widetilde{f^*}(k) = \tilde{f}(-k) \tag{1.77}$$

On définit un espace-temps non commutatif en remplaçant les coordonnées locales $x_i$de

$\mathfrak{R}^D$Par des opérateurs hermétiques $\hat{x}_i$qui vérifient la relation de commutation [11] :

$$[\hat{x}_i; \hat{x}_j] = i\theta_{ij} \tag{1.78}$$

La quantification de Weyl consiste à faire une correspondance biunivoque entre l'algèbre des fonctions $f\ (x)$ définies sur $\mathfrak{R}^D$et l'algèbre des opérateurs. On définit le symbole de Weyl par :

$$\widehat{W}[f] = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \tilde{f}(k) e^{ik_i \hat{x}^i} \tag{1.79}$$

Où $\tilde{f}(k)$est la transformée de Fourier de (x) .Si $f\ (x)$ est fonction réelle alors l'opérateur de Weyl $\widehat{W}[f]$ est hermitien.

$$\widehat{W}^+[f] = \widehat{W}[f] \tag{1.80}$$

3.2 Le produit de Moyal (Produit star) :

Notre but est de trouver un produit (noté produit star *) pour des fonctions (ordinaires) définies sur un espace de Minkowski qui permet au symbole de Weyl d'être un homomorphisme pour la multiplication. En d'autres termes on veut trouver un produit star tel que : Le produit de deux opérateurs de Weyl de deux fonctions soit égal à l'opérateur de Weyl associé au produit star de deux fonctions [11] [12] :

$$\widehat{W}[f]\widehat{W}[g] = \widehat{W}[f * g] \tag{1.81}$$

En d'autres termes on a

$$(A,*) = (\hat{A},.) \tag{1.82}$$

L'information sur la non commutativité de l'espace – temps est codée dans le produit star. En effet :

$$\widehat{W}[f]\widehat{W}[g] = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \tilde{f}(k) e^{ik_\mu \hat{x}^\mu} \int \frac{d^D l}{(2\pi)^D} \tilde{g}(l) e^{il_\mu \hat{x}^\mu}$$

$$= \iint \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{d^D l}{(2\pi)^D} \tilde{f}(k) \tilde{g}(l) e^{ik_\mu \hat{x}^\mu} e^{il_\mu \hat{x}^\mu} \tag{1.83}$$

En utilisant la formule de Baker – Campbell – Hausdorff

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A;B]}$$

Valable pour les opérateurs A et B tel que[12] :

$$[A;[A;B]] = [B;[A;B]] = 0$$

On trouve :

$$\widehat{W}[f]\widehat{W}[g] = \iint \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{d^D l}{(2\pi)^D} \tilde{f}(k) \tilde{g}(l) e^{[i(k_\mu + l_\mu)\hat{x}^\mu]} e^{\left[-\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} k_\mu l_\nu\right]} \tag{1.84}$$

En effectuant le changement de variable $l = q - k$alors :

$$\widehat{W}[f]\widehat{W}[g] = \iint \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \tilde{f}(k) \tilde{g}(q-k) e^{[iq_\mu \hat{x}^\mu]} e^{\left[-\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} k_\mu q_\nu\right]} \tag{1.85}$$

Remarque que lors du changement de variable

$$\theta^{\mu\nu} k_\mu l_\nu = \theta^{\mu\nu} k_\mu (q_\nu - k_\nu)$$

$$= \theta^{\mu\nu} k_\mu q_\nu - \theta^{\mu\nu} k_\mu k_\nu$$

$$= \theta^{\mu\nu} k_\mu q_\nu - \frac{i}{2}\left[\theta^{\mu\nu} k_\mu k_\nu + \theta^{\nu\mu} k_\mu k_\nu\right]$$

$$= \theta^{\mu\nu} k_\mu q_\nu \tag{1.86}$$

D'autre part on peut écrire le second membre de l'équation (2.6) comme suit [12] :

$$\widehat{W}[f * g] = \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \overline{(f * g)}(q) e^{(iq_\mu \hat{x}^\mu)} \tag{1.87}$$

Par identification on trouve que

$$\overline{(f * g)}(q) = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \tilde{f}(k) \tilde{g}(q-k) e^{\left[-\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} k_\mu q_\nu\right]} \tag{1.88}$$

D'où le produit :

$$(f * g)(x) = \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \overline{(f * g)}(q) e^{(iq_\mu x^\mu)}$$

$$= \iint \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \tilde{f}(k) \tilde{g}(q-k) e^{[iq_\mu x^\mu]} e^{\left[-\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} k_\mu q_\nu\right]} \tag{1.89}$$

On peut montre que ce produit peut s'écrire sous la forme[12] :

$$(f * g)(x) = e^{\left[-\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} \partial_\mu^\xi \partial_\nu^\eta\right]} f(x+\xi) g(x+\eta)|_{\xi=\eta=0}$$

En effet :

$$f(x) = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \tilde{f}(k) e^{[ik_\mu x^\mu]} \Leftrightarrow f(x+\xi) = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \tilde{f}(k) e^{[ik_\mu (x+\xi)^\mu]}$$

$$g(x) = \int \frac{d^D P}{(2\pi)^D} \tilde{g}(P) e^{[iP_\nu x^\nu]} \Leftrightarrow g(x+\eta) = \int \frac{d^D P}{(2\pi)^D} \tilde{g}(P) e^{[iP_\nu (x+\eta)^\nu]}$$

$$\Rightarrow e^{\left[\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} \partial_\mu^\nu \partial_\mu^\nu\right]} f(x+\xi) g(x+\eta)|_{\xi=\nu=0}$$

$$= e^{\left[\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} \partial_\mu^\nu \partial_\mu^\nu\right]} \left[\iint \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{d^D P}{(2\pi)^D} \tilde{f}(k) \tilde{g}(P) e^{[ik_\mu (x+\xi)^\mu]} e^{[iP_\nu (x+\eta)^\nu]}\right]$$

$$= \iint \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{d^D P}{(2\pi)^D} e^{\left[\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} (ik_\mu)(iP_\nu)\right]} \tilde{f}(k) \tilde{g}(P) e^{[ik_\mu x^\mu]} e^{[iP_\nu x^\nu]}$$

On pose $p_\mu = q_\mu - k_\mu$

$$= \iint \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{\left[-\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu k_\mu q_\nu}\right]} \tilde{f}(k) \tilde{g}(q-k) e^{[iq_\mu x^\mu]}$$

$= (f * g)(x)$

Donc :

$$(f * g)(x) = e^{\left[\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu}\,\partial_\mu^\nu\,\partial_\mu^\nu\right]} f(x+\xi)g(x+\eta)|_{\xi=\eta=0} \tag{1.90}$$

Notation[12] [13] :

La quantité : $e^{\left[-\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu}k_\mu q_\nu\right]}$est appelée le facteur de la phase non commutative

$$k \wedge q = \frac{i}{2}\theta^{\mu\nu}k_\mu q_\nu$$

$$\theta^{\mu\nu}k_\mu = \tilde{k}^\nu \tag{1.91}$$

Une autre écriture du produit star est la suivante :

$$f(x) * g(x) = f(x)e^{\left[\frac{i}{2}\overleftarrow{\partial_\mu}\theta^{\mu\nu}\overrightarrow{\partial_\nu}\right]}g(x) \tag{1.92}$$

On peut développer le produit star comme suit :

$$f * g = fg + \frac{i}{2}\theta^{\mu\nu}\,\partial_\mu f\,\partial_\nu g + 0(\theta^2)$$

$$f(x) * g(x) = f(x)g(x) + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{i}{2}^n\frac{1}{n!}\theta^{\mu_1\nu_1}\ldots.\theta^{\mu_1\nu_1}\partial_{\mu_1}\partial_{\mu_n}\ldots f(x)\partial_{\nu_1}..\nu_{\mu_n}g(x) \tag{1.93}$$

Les propriétés du produit star (produit de Moyal)

Dans cette partie, nous récapitulons quelques identités utiles de l'algèbre de produit star.

1- Lorsque $\theta = 0$ on trouve :

$$f(x) * g(x) = f(x)g(x) \tag{1.94}$$

On retrouve donc le cas commutatif

2- le produit star entre exponentiels :

$$e^{ikx} * e^{ixq} = e^{i(k+q)x}e^{\frac{i}{2}(k\wedge q)}$$

$$k \wedge q = k^\mu q^\nu \theta_{\mu\nu} \tag{1.95}$$

3- représentation de l'espace d'impulsion :

Soient f etg, htrois fonctions arbitraires a partir de $\mathbb{R}^4$

$$f(x) = \int \tilde{f}\,(k)e^{ikx}d^4k g(x) = \int \tilde{g}\,(k)e^{ikx}d^4k$$
$$h(x) = \int \tilde{h}\,(k)e^{ikx}d^4k$$

$\tilde{f}$ (k), $\tilde{g}$ (k), $\tilde{h}$ (k), Les transformées du Fourier des fonctions f $geth$respectivement.

Alors en utilisant (1.95)

$$(f * g)(x) = \tilde{f}(k)\tilde{g}(q)e^{i(k\theta q)/2}e^{i(k+q)x}d^4kd^4q \tag{1.96}$$

4- l'associativité :

En utilisant la propriété (1.96)on trouve

$$[(f * g) * h](x) = \int \tilde{f}(k)\tilde{g}(q)\,\tilde{h}\,(\mathrm{p})e^{-\frac{i(k\theta q)}{2}}e^{-\frac{i[(k+q)\theta p]}{2}}e^{i(k+q+P)x}d^4kd^4qd^4P$$

$$[f * (g * h)](x) = \int \tilde{f}(k)\tilde{g}(q)\,\tilde{h}\,(\mathrm{p})e^{-\frac{i(q\theta p)}{2}}e^{-\frac{i[(k\theta(q+p)]}{2}}e^{i(k+q+P)x}d^4kd^4qd^4P \tag{1.97}$$

Donc :

$$(f * g) * h = f * (g * h) \tag{1.98}$$

5- produit star sous le signe intégral

$$\int (f * g)(x)\,d^4x = \int (g * h)(x)\,d^4x = \int (g.h)\,(x)d^4x \tag{1.99}$$

En utilisant (1 .98) nous pouvons immédiatement effectuer l'intégration sur xqui donnera un $\delta^4(k+q)$

n raison de l'antisymétrique deθ, l'exposant disparaît ainsi :

$$\int (f * g)(x)\,d^4x = \int d^4\mathrm{k}\,\tilde{f}(k)\tilde{g}(-k) = \int (f.g)\,(x)d^4x \tag{1.100}$$

de(1.99)nous pouvons déduire la propriété cyclique :

$$\int (f_1 * f_2 * \ldots f_{\mathrm{n}}(x) d^4 x) = \int (f_n * f_1 * \ldots f_{\mathrm{n}-1}(x) d^4 x) \tag{1.101}$$

6- La conjugaison complexe :

$$(f * g)^{CC} = g^{cc} * f^{cc} \tag{1.102}$$

7- le produit star est non commutatif :

$$f * g \neq g * f \tag{1.103}$$

Par contre :

$$g * f = f * g|_{\theta \to 0} Etaussi \{f, g\}_{M,B} = f * g|_{\theta} - f * g|_{\theta \to 0} \tag{1.104}$$

8-$f * g * h|_{\theta} = h * g * f|_{\theta \to 0}$ (1.105)

$9 - \left[e^{ikx} e^{iqx}\right] = 2\mathrm{ie}^{\mathrm{i(k+q)}x} \sin(ik \wedge q)$

10- la règle de Leibniz : $\partial_\mu (f * g) = \partial_\mu f * g + f * \partial_\mu g$ (1.106)

3 -3 Algèbre d'espace-temps non-commutative :

En mécanique quantique ordinaire, les relations de commutation canoniques dans l'espace de phase prennent la forme [14]:

$$\left[\hat{\mathrm{X}}_i, \hat{\mathrm{X}}_j\right] = 0$$

$$\left[\hat{p}_i, \hat{p}_j\right] = 0$$

$$\left[\widehat{\mathrm{X}}_i, \widehat{\mathrm{P}}_j\right] = i\hbar\delta_{ij} \tag{1.107}$$

La géométrie espace-temps non commutative est une géométrie où les coordonnées de l`espace-temps ne commutent pas, dont la forme générale des commutateurs [14]:

$$\left[\widehat{\mathrm{X}}_i, \widehat{\mathrm{X}}_j\right] \neq 0 \ \ et \left[\hat{\mathrm{p}}_i, \hat{\mathrm{p}}_j\right] \neq 0 \tag{1.108}$$

Et l'algèbre non commutative dans la forme générale présente par les relations suivantes [13]:

$$\left[\widehat{\mathrm{X}}_i, \widehat{\mathrm{X}}_j\right] = i\sigma_{ij}$$

$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = i\sigma_{ij}$

$[\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\sigma_{ij}$ (1.109)

Les quantités θ_{ij} et σ_{ij} sont des paramètres antisymétriques réelles pouvant dépendre des opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}$ et satisfaisant à :

$\theta_{ij} = \varepsilon_{ij}\theta$ (1.110)

$\sigma_{ij} = \varepsilon_{ij}\sigma$ (1.111)

Avec:

$$\varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji} = 1$$

Lorsque on pose $\theta \rightarrow 0$ ou $\sigma \rightarrow 0$ nous trouvons les relations de la mécanique quantique ordinaire (commutative).

3.4 - Non commutativité positionnelle:

Dans la littérature, on s'intéresse plus souvent à un cas particulier de l'algèbre non commutative dans laquelle les coefficients sont nuls. Ainsi, la non commutativité n'est réalisée que sur les opérateurs position par le biais des paramètres (Non commutativité positionnelle) . L'algèbre au-dessus se réécrit donc [14] :

$[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = i\theta_{ij}$ $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$ $[\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\sigma_{ij}$ (1.112)

Où sont des paramètres réels antisymétriques et ont une dimension de $[longueur]^2$, et jouent un rôle analogue à dans la mécanique quantique ordinaire.

3.5 Conséquences pour la théorie quantique:

Les relations de commutation $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = i\sigma_{ij}$ impliquent les inégalités d'Heisenberg [14]:

$\Delta\hat{X}_i\Delta\hat{X}_j \geq \frac{1}{2}|\theta_{ij}|$ (1.113)

C'est-à-dire que la particule ne peut plus être localisée de manière précise. L'espace prend alors une structure de réseau.

Dans la suite, on se restreint au cas de non-commutativité positionnelle où les opérateurs d'impulsion commutent entre eux, (C'est l'algèbre la plus fréquemment rencontrée dans la littérature).

Au cas où la dimension d'espace est D=2 on peut représenter les relations ci-dessus comme[14]:

$$[\hat{x},\hat{y}] = i\theta$$

$$[\hat{y},\hat{x}] = -i\theta$$

$$[\hat{x},\hat{p}_x] = [\hat{y},\hat{p}_y] = i\hbar$$

$$[\hat{p}_x,\hat{x}] = [\hat{p}_y,\hat{y}] = -i\hbar$$

$$[\hat{x},\hat{p}_y] = [\hat{y},\hat{p}_x] = 0$$

$$[\hat{p}_x,\hat{p}_y] = [\hat{p}_y,\hat{p}_x] = 0 \qquad (1.114)$$

3.6 Moment cinétique dans l'espace non commentatif :

En défini l'opérateur du moment cinétique angulaire $\vec{L}$ dans l'espace non commutative par la remplacement les produits ordinaires avec le produit étoile[15] :

$$\vec{L}_{*}= \left(\hat{y} * \hat{p}_{\mathrm{Z}} - \widehat{\mathrm{Z}} * \hat{p}_{\mathrm{y}}\right)\vec{\imath} + \left(\widehat{\mathrm{Z}} * \hat{p}_{\mathrm{X}} - \widehat{\mathrm{X}} * \hat{p}_{\mathrm{Z}}\right)\vec{\jmath} + \left(\widehat{\mathrm{X}} * \hat{p}_{\mathrm{Y}} - \widehat{\mathrm{Y}} * \hat{p}_{\mathrm{X}}\right)\vec{k} \qquad (1.115)$$

Avec : $\vec{L}_{*}$ le moment cinétique dans l'espace non commutative.

Puits en utilisons la relation suivante[15] :

$$A * B = AB + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{i}{2}\right)^{n}\frac{1}{n!}\theta^{u_1 v_1} \dots\dots \theta^{u_n v_n} \cdots\cdot \partial_{i_1} \cdots\cdot \partial_{i_n} A \partial_{v_1} \dots\cdot \partial_{v_n} B \qquad (1.116)$$

En trouve

$$\vec{L}_{*}= \vec{L} + \left(\frac{i}{2}\right)\left[\theta^{ij}\partial_i\hat{y}\partial_j\hat{p}_{\mathrm{Z}} - \theta^{ij}\partial_i\widehat{\mathrm{Z}}\partial_j\hat{p}_{\mathrm{y}}\right]\vec{\imath} + \frac{i}{2}\left[\theta^{ij}\partial_i\widehat{\mathrm{Z}}\partial_j\hat{p}_{\mathrm{X}} - \theta^{ij}\partial_i\widehat{\mathrm{X}}\partial_j\hat{p}_{Z}\right]\vec{\jmath} + \frac{i}{2}\left[\theta^{ij}\partial_i\widehat{\mathrm{X}}\partial_j\hat{p}_{\mathrm{y}} - \theta^{ij}\partial_i\hat{y}\partial_j\hat{p}_{\mathrm{X}}\right]\vec{k}$$

Cette dernière relation prendre la forme suivante [15] :

$$\vec{L}_{*}=\vec{L}+\left(\frac{i}{2}\right)\left[\theta^{yZ}\partial_{Z}\hat{p}_{Z}-\theta^{Zy}\partial_{y}\hat{p}_{y}\right]\vec{\imath}+\frac{i}{2}\left[\theta^{ZX}\partial_{X}\hat{p}_{X}-\theta^{XZ}\partial_{X}\hat{p}_{Z}\right]\vec{\jmath}$$
$$-\frac{i}{2}\left[\theta^{Xy}\partial_{y}\hat{p}_{y}-\theta^{yX}\partial_{X}\hat{p}_{X}\right]\vec{k}$$

Donc, en peut déduire

$$\vec{L}_{*}=\vec{L}+\vec{\theta}\wedge\vec{P}=\left(\vec{r}+\vec{\theta}\right)\wedge\vec{P} \tag{1.117}$$

Avec :

$$\vec{\theta}=\theta^{X_i}\partial_i\vec{\imath}+\theta^{y_i}\partial_i\vec{\jmath}+\theta^{Z_i}\partial_i\vec{k} \tag{1.118}$$

Alor, nous avons défini un décalage sur les coordonnées d'espace [15] :

$$X_i \rightarrow X_i+\frac{i}{2}\theta^{ij}\vec{\partial}_j \tag{1.119}$$

Si en utilisons le principe de correspondance en trouve [14]:

$$X_i \rightarrow X_i-\frac{1}{2\hbar}\theta_{ij}\vec{p}_j \tag{1.120}$$

En résumé, en mécanique quantique non commutative on peut utiliser l'opérateur du moment cinétique angulaire avec le produit vectoriel ordinaire des quantité de mouvement et les coordonnées de l'espace- temps à condition de décaler l'argument avec une quantité égale à $\frac{i}{2}\theta^{ij}\vec{\partial}_j$ (1.121)

Chapitre IV :

L’Atome d’Hydrogène dans l'espace non commutatif

4 1 l equation de Schrödinger sur un espace–temps NC:

En mécanique quantique ordinaire (commutative), le potentiel agit sur la fonction d'onde comme un opérateur de multiplication, à savoir en mécanique quantique non commutative, le potentiel agit sur au moyen du produit star, On aura alors la correspondance [16] :

$$V(\hat{x}) \cdot \psi(\hat{x}) \rightarrow V(\hat{x}) * \psi(\hat{x}) \quad (1.122)$$

$$V(\hat{x}) * \psi(\hat{x}) = V(\hat{x})\psi(\hat{x}) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (\frac{i}{2})^n \partial_{i1} \dots \partial_{in} \dots V(\mathrm{X}) \theta^{i_1 j_1} \dots \theta^{i_n j_n} \partial_{j_1} \dots \partial_{j_n \psi(x)} \quad (1.123)$$

Après la présentation des différentes algèbres de commutateurs qui généralisent l'algèbre de *Heisenberg* à un espace non-commutatif, on va définir le moyen usuel de réaliser cette algèbre qui e*st* Le produit de Weyl-Moyal *(*Produit star), cela nous amène à écrire une relation entre les coordonnées commutatives et les coordonnées non commutatives ce que l'on appelle *(Bopp shift)*, enfin on va utiliser cet outil pour former l'équation de Schrödinger dans un espace non commutative

Donc on peut écrire l'équation de Schrödinger en fonction des opérateurs ordinaire x et P, et en utilisant le produit star [16] [17]:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\hat{x}, t)}{\partial t} = \frac{\widehat{p^2}}{2m} \psi(\hat{x}, t) + V(\hat{x}) * \psi(\hat{x}, t) \quad (1.124)$$

$$V(\hat{x}) * \psi(\hat{x}) = V(\hat{x})\psi(\hat{x}) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (\frac{i}{2})^n \partial_{i1} \dots \partial_{in} \dots V(\mathrm{X}) \theta^{i_1 j_1} \dots \theta^{i_n j_n} \partial_{j_1} \dots \partial_{j_n \psi(x)} \quad (1.125)$$

$$\partial_{jk} = \frac{\partial}{\partial x^{jk}}$$

$$i p_{jk} = \hbar \frac{\partial}{\partial x^{jk}}$$

On prend : $\hbar = 1 i p_{jk} = \frac{\partial}{\partial x^{jk}}$

On replace ∂_{jk}par:$\partial_{jk} = i p_{jk}$

Alors:

$$V(\hat{x}) * \psi(\hat{x}) = V(\hat{x})\psi(\hat{x}) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (\frac{i}{2})^{n} \partial_{i1} \dots \partial_{in} \dots V(\mathrm{X}) \theta^{i_1 j_1} \dots \theta^{i_n j_n} p_{j_1} \dots p_{j_n \psi(x)}$$

On pose :

$$\tilde{p}_{jk=\theta^{ik\ jk} P_{jk}}$$

$$V(\hat{x}) * \psi(\hat{x}) = V(\hat{x})\psi(\hat{x}) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (\frac{i}{2})^{n} \partial_{i1} \dots \partial_{in} V(\mathrm{X}) \tilde{p}_{i1} \dots \tilde{p}_{j_n \psi(x)} \quad (1.126)$$

La transformation de Fourier de $V(\mathrm{X})$:

$V(\mathrm{X}) = \int dKe^{(ikx)} \hat{v}\ (\mathrm{k})$(1.127)

$$\mathrm{V}(\hat{\mathrm{x}}) * \psi(\hat{\mathrm{x}}) = \mathrm{V}(\hat{\mathrm{x}})\psi(\hat{\mathrm{x}}) + \sum_{\mathrm{i}=1}^{\infty} \frac{1}{\mathrm{n}!} (-\frac{1}{2})^{\mathrm{n}}\, \partial_{\mathrm{i}1} \dots \partial_{\mathrm{in}} \int \mathrm{dKe}^{(\mathrm{ikx})} \widehat{\mathrm{V}}\ (\mathrm{k}) \tilde{\mathrm{p}}_{\mathrm{i}1} \dots \tilde{\mathrm{p}}_{\mathrm{j_n}\psi(\mathrm{x})}$$

$$= \mathrm{V}(\hat{\mathrm{x}})\psi(\hat{\mathrm{x}}) + \sum_{\mathrm{i}=1}^{\infty} \frac{1}{\mathrm{n}!} (-\frac{1}{2})^{\mathrm{n}} (\mathrm{i})^{\mathrm{n}} \int \mathrm{dKe}^{(\mathrm{ikx})} (\mathrm{k}\,\tilde{\mathrm{p}}\,)^{\mathrm{n}}\, \widetilde{\mathrm{V}}(\mathrm{k})\ \psi(\mathrm{x})$$

$$= \mathrm{V}(\hat{\mathrm{x}})\psi(\hat{\mathrm{x}}) + \int \mathrm{dK}\widetilde{\mathrm{V}}(\mathrm{k}) \sum_{\mathrm{i}=1}^{\infty} \frac{1}{\mathrm{n}!} (-\frac{1}{2})^{\mathrm{n}} (\mathrm{i})^{\mathrm{n}} (\mathrm{k}\,\tilde{\mathrm{p}}\,)^{\mathrm{n}}\ \mathrm{e}^{(\mathrm{ikx})}\ \psi(\mathrm{x})$$

$$= \mathrm{V}(\hat{\mathrm{x}})\psi(\hat{\mathrm{x}}) + \int \mathrm{dK}\widetilde{\mathrm{V}}(\mathrm{k})\ \ (\mathrm{e}^{\left(\frac{-1\mathrm{k}.\tilde{\mathrm{p}}}{2}\right)-1}) \mathrm{e}^{(\mathrm{ikx})}\ \psi(\mathrm{x})$$

$$= \mathrm{V}\ (\hat{\mathrm{x}})\psi(\hat{\mathrm{x}}) + \int \mathrm{dK}\tilde{\mathrm{v}}(\mathrm{k})\mathrm{e}^{\mathrm{ik}(\mathrm{x}-\frac{\mathrm{p}}{2})}\ \psi(\mathrm{x}) - \int \mathrm{dK}\widetilde{\mathrm{V}}(\mathrm{k})\ \mathrm{e}^{(\mathrm{ikx})}\ \psi(\mathrm{x})$$

$$= \mathrm{V}(\hat{\mathrm{x}})\psi(\hat{\mathrm{x}}) + \int \mathrm{dK}\widetilde{\mathrm{V}}(\mathrm{k})\mathrm{e}^{\mathrm{ik}(\mathrm{x}-\frac{\tilde{\mathrm{p}}}{2})}\ \psi(\mathrm{x}) - \mathrm{V}(\mathrm{X})\psi(\mathrm{x})$$

$$= \int \mathrm{dK}\widetilde{\mathrm{V}}(\mathrm{k})\mathrm{e}^{\mathrm{ik}\left(\mathrm{x}-\frac{\hat{\mathrm{p}}}{2}\right)}\ \psi(\mathrm{x})$$

$$= \mathrm{V}\left(\mathrm{x} - \frac{\hat{\mathrm{p}}}{2}\right)\ \psi(\mathrm{x})$$

En résumé, en mécanique quantique non commutative on peut utiliser l'équation de Schrödinger avec la multiplication et les coordonnées de l'espace- temps ordinaires à condition de décaler l'argument de potentiel d'une quantité égale à $\frac{\hat{p}}{2}$

$$\mathrm{V}(\hat{x}) * \psi(\hat{x}) = \mathrm{V}\left(x - \frac{\hat{p}}{2}\right) \psi(x) \tag{1.128}$$

4 2 Le décalage "Bopp shift":

On peut écrire les opérateurs d'espace-temps non commutatifs $\hat{x}_i et\, \hat{p}_i$ en termes des opérateurs ordinaires de positions x_i et d'impulsions p_i en utilisant la transformation suivante [18] :

$$\hat{x}_i = x_i - \frac{\theta_{ij}}{2} p_j \tag{1.129}$$

$$\hat{p}_i = p_i \tag{1.130}$$

La dernière transformation s'appelle : Le décalage de Bopp "Bopp shift". Au cas où la dimension d'espace est D=2 on peut représenter les relations ci-dessus comme:

$(\sigma_{ij} = \varepsilon_{ij}\sigma$ et$\varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji} = 1)$

$$\hat{x} = x - \frac{\theta_{ij}}{2} p_y = x - \frac{\theta}{2} p_y$$

$$\hat{y} = y - \frac{\theta_{ij}}{2} p_x = y + \frac{\theta_{ij}}{2} p_x = y + \frac{\theta}{2} p_x$$

$$\hat{p}_x = p_x \quad , \quad \hat{p}_y = p_y \tag{1.131}$$

L' hamiltonien d'un système évoluant dans un espace non-commutatif est obtenu en remplaçant dans l'expression d' hamiltonien ordinaire les opérateurs canoniques: $x$et p par leurs équivalents non-commutatifs $\hat{x}$et$\hat{p}$ [17] [18] :

$$H(x, \mathrm{p}) = H(\hat{x}, \hat{p}) \tag{1.132}$$

$$H(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{\widehat{p^2}}{2m} + \mathrm{V}(\hat{x}) \tag{1.133}$$

Pour notre travail on construire l' hamiltonien avec le décalage Bopp shift ;

$$H(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{\widehat{P^2}}{2m} + \mathrm{V}\left(\hat{x} - \frac{\hat{p}}{2}\right) \tag{1.134}$$

En résumé, en mécanique quantique non commutative, l' hamiltonien décrivant le système peut être exprimé, soit en fonction des opérateurs $\hat{X}$ et $\hat{P}$ soit en fonction des opérateurs

X $et\ P$ satisfaisant des relations de commutation canonique maisagissant sur la fonction d'onde au moyen du produit star.

4 3 Atome d'hydrogène sur un espace non commutatif:

L'hamiltonien non relativiste représentant l'atome d'hydrogène a l'expression suivante [17] [18] :

$$\boldsymbol{\hat{H}}=\frac{\widehat{p^2}}{2m}+\mathrm{V(r)} \qquad (1.135)$$

$V(\mathrm{r})$est le potentiel central créé par le proton de charge $+|\mathrm{q}|$ (le potentiel de Coulomb)

$$\mathrm{V(r)}=\frac{-\mathrm{e}^2}{\mathrm{r}}\ ,\mathrm{e}^2=\frac{\mathrm{q}^2}{4\pi\varepsilon_0} \qquad (1.136)$$

En termes de coordonnées non commutatives on écrit [17] [18] :

$$\mathrm{V(r)}=\frac{-\mathrm{e}^2}{\mathrm{r}}=\frac{-\mathrm{e}^2}{\sqrt{\hat{x}_i.\hat{x}_i}} \qquad (1.137)$$

où:

$$\hat{x}_i.\hat{x}_i=\sum\hat{x}_i.\hat{x}_i$$

Avec $\hat{x}$ et $\hat{p}$ satisfaisant les équations de commutation précédentes :

$$[\hat{\mathrm{X}}_i,\hat{\mathrm{X}}_j]=i\theta_{ij}\ [\hat{\mathrm{p}}_i,\hat{\mathrm{p}}_j]=0 \quad et\ [\hat{\mathrm{X}}_i,\hat{\mathrm{P}}_j]=i\hbar\delta_{ij}$$

Rappelons que $\hat{x}_i et\ \hat{p}_i$ (avec chapeau) indique les coordonnées et les moments dans un espace non commutatif.

Nous utilisons maintenant le nouveau système de coordonnées(1.129)(1.130):

$$x_i=\hat{x}_i+\frac{\theta_{ij}}{2\hbar}\hat{p}_j$$

$$\hat{p}_i=\mathrm{p_i}$$

Avec x_i , p_i (sans chapeau) désigne les coordonnées et les moments commutatifs

Satisfaisant les commutateurs suivants [17] [18]:

$$\left[\hat{X}_i,\hat{X}_j\right]=0$$

$$\left[\hat{p}_i,\hat{p}_j\right]=0$$

$$\left[\hat{X}_i,\hat{P}_j\right]=i\hbar\sigma_{ij}$$

Dans le nouveau système de coordonnées, l'énergie cinétique $\frac{\widehat{p^2}}{2m}$ reste invariante, par contre le potentiel coulombien devient :

$$V(r)=\frac{-e^2}{\sqrt{\hat{x}_i.\hat{x}_i}}=-\frac{e^2}{\sqrt{\left(x_i-\frac{\theta_{ij}}{2\hbar}p_j\right)(x_i-\frac{\theta_{ij}}{2\hbar}p_k)}}$$

$$V(r)=-\frac{e^2}{\sqrt{(x_ix_i-\frac{x_i\theta_{ij}p_j}{\hbar}+\sigma(\theta^2))}}$$

$$V(r)=-\frac{e^2}{\sqrt{(r^2-\frac{x_i\theta_{ij}p_j}{\hbar}+\sigma(\theta^2))}}$$

$$V(r)=-\frac{e^2}{r\sqrt{(1-\frac{x_i\theta_{ij}p_j}{r^2\hbar}+\sigma(\theta^2))}}$$

$$V(r)=-\frac{e^2}{r}(1+\frac{x_i\theta_{ij}p_j}{r^2\hbar}+\sigma(\theta^2)$$

$$V(r)=-\frac{e^2}{r}-\frac{e^2}{r^3\hbar}x_i\theta_{ij}p_j\ +\sigma(\theta^2) \qquad (1.138)$$

Posons :

$$\theta_{ij}=\tfrac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\theta_k \text{et}\begin{cases}\varepsilon_{ijk}=\varepsilon_{jki}=\varepsilon_{kij}=1\\ \varepsilon_{ikj}=\varepsilon_{jik}=\varepsilon_{kji}=-1\end{cases} \qquad (1.139)$$

Donc, à l'aide de l'équation(1.135), le deuxième terme de l'équation(1.134) devient:

$$-\frac{e^2}{2\hbar r^3}\sum x_i\theta_{ij}p_j=-\frac{e^2}{4\hbar r^3}\sum x_i\varepsilon_{ijk}\theta_k p_j$$

$$= -\frac{e^2}{4\hbar r^3}[(x_2p_3 - x_3p_2)\theta_1 + (x_3p_1 - x_1p_3)\theta_2 + (x_1p_2 - x_2p_1)\theta_3]$$

$$= -\frac{e^2}{4\hbar r^3}[L_1.\theta_1 + L_{1..}\theta_2 + L_3.\theta_3]$$

$$= -\frac{e^2}{4\hbar r^3}[\vec{L} \cdot \vec{\theta}] \quad (1.140)$$

Alors :

$$V(r) = \frac{-e^2}{r} - \frac{e^2}{4\hbar r^3}(\vec{L} \cdot \vec{\theta}) + \varphi(\theta^2) \quad (1.141)$$

Supposant que$\vec{\theta}$est un vecteur orienté dans la direction $\vec{K}$ on écrit[17] [18] :

$$\vec{\theta} = \theta_3\vec{K} \Rightarrow \vec{L} \cdot \vec{\theta} = L_Z \cdot \theta_3 = \theta \cdot L_Z \quad (1.142)$$

Donc :

$$V(r) = \frac{-e^2}{r} - \left(\frac{e^2\theta}{4\hbar}\right)\frac{L_Z}{r^3} + \varphi(\theta^2) \quad (1.143)$$

L' hamiltonien$\widehat{H_\theta}$ devient [17] [18]:

$$\widehat{H}_\theta = \frac{\widehat{P}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{4\hbar}\frac{(\vec{L} \cdot \vec{\theta})}{r^3} \quad (1.144)$$

D'après cette expression on remarque que le potentielle de coulomb est déformée dans l'espace non commutative, cette déformation est introduit sous forme d'une perturbation proportionnel à $\propto \frac{1}{r^3}$. (1.145)

Nous notons que l'expression ci-dessus est très semblable à celle de l'accouplage spin-orbite.

$$\widehat{W}_{S\,0} = \frac{e^2}{2m^2C^2}\frac{(\vec{L} \cdot \vec{S})}{r^3} \quad (1.146)$$

4 4 La solution exacte de l'équation de Schrödinger dans l'espace NC

Dans cette section, en cherche une solution analytique exacte de l'équation de Schrödinger pour trouver les corrections sur les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène ; d'après l'équation (1.140) en effectue une généralisation sur la partie radiale$\tilde{R}$, de l'équation de Schrödinger, en plus précisément la fonction$\tilde{u}(r)$ l'éq (2.3), suivante [17] [18]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dr}^2}+\frac{\hbar^2 l(l\pm 1)}{2m\mathrm{r}^2}-V(\mathrm{r})\right]u(\mathrm{r})=\mathrm{E}u(\mathrm{r}) \tag{1.147}$$

Avec : $V(r)=\frac{-Ze^2}{r}-\frac{\theta e^2}{4\hbar}\frac{l_Z}{r^3}=\frac{-Ze^2}{r}-\frac{\theta e^2}{4\hbar}\frac{\hbar m}{r^3}$

On a choisir une solution sous la forme suivante [17] [18] :

$$\tilde{u}(r)=u(r)+\theta A(r) \tag{1.148}$$

Quand $\theta\to 0\Rightarrow\tilde{u}\to u$

et on a :$u(r)=rR_{n,l}^{(r)}$ (1.149)

Donc :

$$u(r)=b_0 e^{\frac{-r}{na}}\left(\frac{r}{a_0}\right)^{l+1}\sum_{V=0}^{n-l-1}(-)^V\left(\frac{2}{n}\right)^V\frac{(n-l-1)!\,(2l+1)!}{(n-l-V-1)!\,V!\,(V+2l+1)!}\left(\frac{r}{a}\right)^V \tag{1.150}$$

L'équation (1.143)devient :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dr}^2}+\frac{\hbar^2 l(l\pm 1)}{2m\mathrm{r}^2}-\frac{Ze^2}{r}-\tilde{E}\right]-+\theta\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dr}^2}+\frac{\hbar^2 l(l-1)}{2M\mathrm{r}^2}-\frac{\theta e^2}{4}\frac{\hbar m}{r^2}-\tilde{E}\right]A(r)=\frac{\theta e^2}{4}\frac{\hbar m}{r^3}u \tag{1.151}$$

Avec $\tilde{E}$ est la correction de l'espace non commutative sur l'énergie de l'atome d'hydrogène.

Cherchons la solution sous la forme d'un développement en série pour la fonction$A(r)$:

$$A(r)=\sum_{n=0}^{\infty}a_q r^q \quad ,\acute{A}(r)=\sum_{n=0}^{\infty}q a_q r^{q-1} \quad ,A''(r)=\sum_{n=0}^{\infty}q(q-1)a_q r^{q-2} \tag{1.152}$$

Donc, l'équation pour $A(r)$ devient [17] [18]

$$\sum_{n'}^{\infty}\left[\frac{-\hbar^2}{2m}q(q-1)a_{q+2}+\hbar^2\frac{l(l+1)}{2M}a_{q+2}-Ze^2a_{q+1}-\frac{\theta\hbar me^2}{4}a_{q+3}-\tilde{E}a_q\right]r^q$$

$$=\frac{\theta e^2}{4}\frac{\hbar m}{r^3}b_0e^{\frac{-r}{na}}\left(\frac{r}{a}\right)^{l+1}\sum_{\upsilon=0}^{n-l-1}(-)^{\upsilon}\left(\frac{2}{n}\right)^{\upsilon}\frac{(n-l-1)!\,(2l+1)!}{(n-l-\upsilon-1)!\,\upsilon!\,(\upsilon+2l+1)!}\left(\frac{r}{a_0}\right)^{\upsilon} \quad (1.153)$$

On pose $q=\upsilon$ et en fait une coupure de la série à l'ordre q

On à donc

$$\frac{-\hbar^2}{2m}q(q-1)a_{q+2}+\hbar^2\frac{l(l+1)}{2M}a_{q+2}-Ze^2a_{q+1}-\frac{\theta\hbar me^2}{4}a_{q+3}=0 \quad (1.154)$$

$$a_q=\frac{1}{\tilde{E}}\frac{\theta e^2}{4}\frac{\hbar m}{r^3}b_0e^{\frac{-r}{na}}\left(\frac{r}{a}\right)^{l+1}(-)^q\left(\frac{2}{na}\right)^q\frac{(n-l-1)!\,(2l+1)!}{(n-l-q-1)!\,q!\,(q+2l+1)!} \quad (1.155)$$

D'où

$$A_q(r)=\frac{1}{\tilde{E}}\frac{\theta e^2}{4}\frac{\hbar m}{r^3}b_0e^{\frac{-r}{na}}\left(\frac{r}{a}\right)^{l+1}\sum_{q=0}^{n-l-1}(-)^q\left(\frac{2}{na}\right)^q\frac{(n-l-1)!\,(2l+1)!}{(n-l-q-1)!\,q!\,(q+2l+1)!}r^q \quad (1.156)$$

La Solution de l équation de Schrödinger dans l'espace non commutative est donne par la fonction d'onde suivante [18] :

$$\psi=R_{n,l}^{(r)}+\theta\frac{1}{r}A_q(r) \quad (1.157)$$

En remarque que le nombre q prendre le rôle d'un nouvel nombre quantique, en passet maintenant au calcule du spectre de l'atome d'hydrogène dans l'espace non commutative.

Pour $q=0$ et $n=2$, $l=0$, $m=0$

$$R_{2,0}^{(r)}=\frac{b_0}{a_0}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{\frac{-r}{2a}}\Rightarrow u_{2,0}=\frac{b_0}{a_0}\left(r-\frac{r^2}{2a}\right)e^{\frac{-r}{2a}} \quad (1.158)$$

$$A_2=\frac{1}{\tilde{E}}\frac{\theta e^2\hbar m b_0}{4a}\left(\frac{1}{r^2}-\frac{r}{2ar}\right)e^{\frac{-r}{2a}} \tag{1.159}$$

On calcul les dérivées :

$$\acute{A}_2=\frac{1}{\tilde{E}}\frac{\theta e^2\hbar m b_0}{4a}\left[\left(\frac{1}{r^2}-\frac{r}{2ar}\right)\left(\frac{-1}{2a}\right)e^{\frac{-r}{2a}}+\left[\frac{-2}{r^3}-\frac{r}{2ar^2}\right]e^{\frac{-r}{2a}}\right] \tag{1.160}$$

$$A''_2=\frac{1}{\tilde{E}}\frac{\theta e^2\hbar m b_0}{4a}\left\{\left[\frac{1}{4a^2}\left(\frac{1}{r^2}-\frac{r}{2ar}\right)e^{\frac{-r}{2a}}+\frac{-1}{2a}\left(\frac{-2}{r^3}-\frac{r}{2ar^2}\right)e^{\frac{-r}{2a}}\frac{-1}{2a}\left[\frac{-2}{r^3}-\frac{r}{2ar^2}\right]e^{\frac{-r}{2a}}\right.\right.$$
$$\left.\left.+\left[\frac{6}{r^4}-\frac{1}{ar^3}\right]e^{\frac{-r}{2a}}\right\}\right]$$

$$=\frac{1}{\tilde{E}}\frac{\theta e^2\hbar m b_0}{4a}e^{\frac{-r}{2a}}\left\{\frac{1}{4a^2r^2}-\frac{1}{8a^3r}+\frac{1}{ar^3}-\frac{1}{4a^2r^2}+\frac{1}{ar^3}-\frac{1}{4a^2r^2}+\frac{6}{r^4}-\frac{1}{ar^3}\right\}$$

$$=\frac{\theta e^2\hbar m b_0}{4a}e^{\frac{-r}{2a}}\left\{\frac{6}{r^4}+\frac{1}{ar^3}-\frac{1}{4a^2r^2}-\frac{1}{8a^3r}\right\} \tag{1.161}$$

En reportant dans l équation radiale, on trouvé [17] [18] :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{\hbar^2 l(l\pm 1)}{2m\mathrm{r}^2}-\frac{Ze^2}{r}-\tilde{E}\right]u$$
$$-\theta\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M\mathrm{r}^2}-\frac{\theta e^2}{4}\frac{\hbar m}{r^2}-\tilde{E}\right]A(r)=\frac{\theta e^2}{4}\frac{\hbar m}{r^3} \tag{1.162}$$

$$\left[\frac{1}{\tilde{E}}\frac{\theta e^2\hbar m b_0}{4a}\left\{-6+\frac{\hbar^2 l(l\pm1)}{2M}+\frac{\theta e^2\hbar m}{8a}\right\}-\frac{e\hbar m}{4r^3}\frac{b_0}{a}\right]\frac{1}{r^4}+\frac{1}{r^3}\left[\frac{1}{\tilde{E}}\frac{\theta e^2\hbar m b_0}{4a}\left\{\frac{-1}{a}-\frac{\hbar^2 l(l\pm1)}{4Ma}-Ze^2\right\}-\right.$$
$$\left.\frac{\frac{e\hbar m b_0}{4r^3\ a}}{2a}\right]+\frac{C}{r^2}\left[\frac{1}{4a^2}+\frac{Ze^2}{2a}-\tilde{E}\right]-\frac{1}{\tilde{E}}\frac{\theta e^2\hbar m b_0}{4a}\frac{\theta e^2\hbar m}{4}\frac{1}{r^5}-\frac{\tilde{E}}{2a}\frac{1}{\tilde{E}}\frac{\theta e^2\hbar m b_0}{4a}\frac{1}{r}=0 \tag{1.163}$$

Cette équation est Vérifiée pour toute Valeur de r Si :

$$\frac{1}{\tilde{E}}\frac{\theta e^2\hbar m b_0}{4a_0}\left\{-6+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M}+\frac{\theta e^2\hbar m}{8a_0}\right\}-\frac{e\hbar m}{4}\frac{b_0}{a_0}=0 \tag{1.163-1}$$

$$\frac{1}{\tilde{E}}\frac{\theta e^2\hbar m b_0}{4a}\left\{\frac{-1}{a}-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{4Ma}-Ze^2\right\}-\frac{\frac{e\hbar m}{4}\frac{b_0}{a}}{2a}=0 \tag{1.163-2}$$

$$\frac{1}{4a^2}+\frac{Ze^2}{2a}-\tilde{E}=0 \tag{1.163-3}$$

Ou, le coefficient $a = \frac{\hbar^2}{\mu q^2}$ à était dans le chapitre 2.

D'apert les équations $(1.163-1)$, $(1.163-2)$ et $(1.163-3)$ en déduire

Pour $n = 2\,, l = 0\,, m = 0$

$$\tilde{E}_1 = \frac{-1}{6\theta e} \qquad (1.164)$$

$$\tilde{E}_2 = \frac{-1}{\theta[e^3 \mathrm{Z} - e]}$$

$$\tilde{E}_3 = \frac{1}{4a^2} + \frac{Ze^2}{2a}$$

On remarque que la correction non commutative criée une dégénérescence sur énergies,

Pour le niveau principal l'énergie sera dégénéré à trois niveaux d'énergie, donc La non commutativité induit un décalage sur le spectre d'énergie.

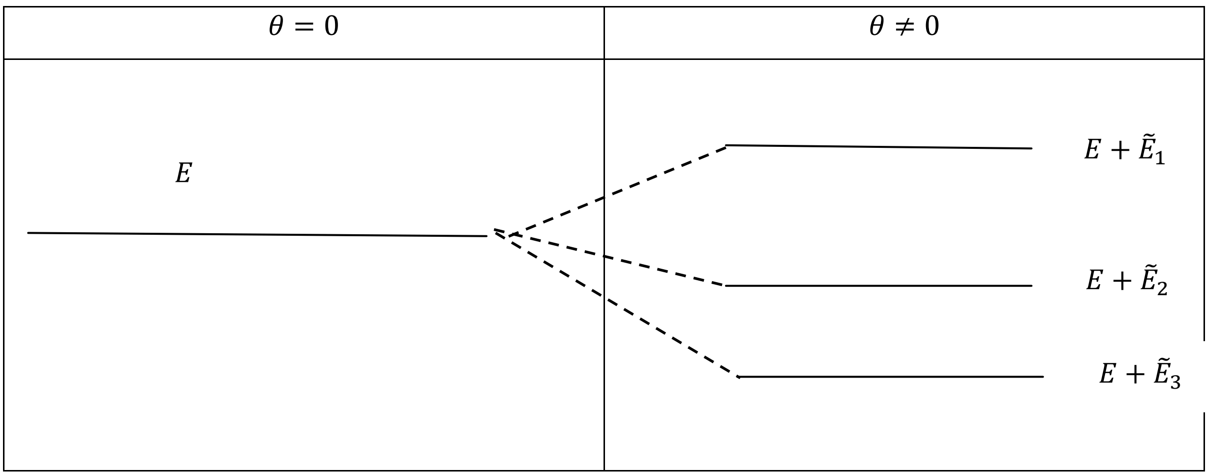

Figure01 : dégénérescence de l'énergie dans l'espace NC

Discussion, basant sur ces résultats il est clair que le modèle adopte pour le shifting de la fonction d'onde n'est plus valable.car a la limite ou $\theta \to 0$,E_3 ne s'annule pas,E_1 et E_2 se divergent de plus ce qui est inacceptable.

Conclusion

CONCLUSION

On a étudié dans ce travail la théorie quantique dans l'espace non commutative qui donne un espoir clé pour l'étude des modèle concernons le problème de la quantification du gravitée et leur unification avec l'autre force fondamentales.

On a présenté l'algèbre de commutateurs qui fondent la géométrie non commutative et qui généralisent la mécanique quantique à un espace non commutatif. On a considéré comme outille pour construire la mécanique quantique non commutatif le produit de Weyl-Moyal (le produit star) et la non commutativité entre les coordonnée d'espace. Nous avons trouvé une même définition du décalage de Bopp shift à partir le calcule du moment cinétique dans l'espace non commutative. On rappelle que le décalage de Bopp shift est un résultat directe de la transformation de Fourier de la produit du potentiel et la fonction d'onde dans l'espace non commutative, ce décalage est signifié l'équivalence entre les coordonnée d'espace ordinaire et les coordonnée l'espace non commutative.

Dans cette mémoire, nous avons démontre que le décalage "Bopp shift" existe aussi dans le moment cinétique, et nous avons étudié l'équation de Schrödinger dans l'espace non commutatif et leur solution analytique pour le potentiel de Coulomb dans l'espace non-commutatif. Cette solution est permit de calcule la correction sur l'énergie da l'atome d'hydrogène dans l'espace non commutatif. Et on a définir une extension le nombre quantique principale n dans l'espace non commutatif.

Par ailleurs, il serait intéressant de traiter aussi les harmoniques sphériques avec le décalage de "Bopp shift" et en calcul leur influence sur l'énergie et aussi sur effet Stark et le Déplacement de Lamb « Lamb shift ».

References’

[1]:N. Seiberg, E. Witten, String Theory and Non commutative Geometry, JHEP 09 (1999)

[2] : Les probabilités non commutatives et représentation probabiliste à la solution de l'équation de Schrödinger. BOUFELGHA Nabila19 /9 /2013aSétif.

[3] : Mécanique Quantique, édité par C. Tannoudji, F. Laloë, université de paris 6. (1973)

[4] : Albert Messiah Mécanique quantique, 2 volumes, Dunod(1959). Réédité en 1995

[5] :] M. Abdlefdil, Mécanique quantique, Chapitre1:Bases de la mécanique quantique, Université Mohammed V-Agda l(2007).

[6] : D. Blokhintsev,Principes de mécanique quantique, Mir Moscou(1981).

[7] : Slimane Zaim, Lamine Khodjab, Yazid Delenda Second-order corrections to the non-commutative K-G equation with a Coulomb potential hep-th /1101.0355v5

[8] :Exercice corrigés de physique atomique bernand hild 1992

[9] : M. Chaichian, M. M. Sheikh-Jabbari, A. Tureanu, Comments on the Hydrogen Atom Spectrum in the Non commutative Space, Eur. Phys. J. C 36 (2002)251,

[10]:physique quantique I et II Prof Frédéric Mila école polytechnique de frédale

[11] :L'Atome d'Hydrogène dans le Formalisme de la Géométrie Non Commutative

Nawel Rezaiki UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE

[12] :L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Quantum mechanics : non-relativistic theory. Pergamon Press, 1977.

[13]:A. Connes , Non commutative geometry, Academic Press (1994)

[4] A.E.F. DJEMAI, H. SMAIL. On Quantum Mechanics on Non commutative Quantum Phase Space hep-th/0309006v2C commun .theor. phys.41(2004)837—844

[15]: KHELILI FARID Aspects mathématiques et physiques de la géométrie non commutative Université de Arizona 2007

[16]: J. HLADIK, M. CHRYOS, P-E. HLADIK, Mécanique quantique, Atomes e Molécules. Applications technologiques, DUNOD (2002).

[17]: calcul des élément de matrice dipolaire dans une géométrie non commutative , Begui Mohamed, magister université de l oued

[18]:M. Chaichian, M. M. Sheikh-Jabbari, A. Tureanu, Hydrogen Atom Spectrum and the Lamb Shift in Non commutative QED, Phys. Rev. Lett. 86(2001) 2716, hep-th/0010175Int.j. Mod.phys.A26(2011)4133.4144

RESUME

Dans ce travail, on à présenter une relation entre les coordonnées commutatives et les coordonnées non commutatives ce que l'on appelle le décalage de *(Bopp shift)*, et on va utiliser cet outil pour reformulera l'équation de Schrödinger dans un espace non commutative, et on cherche la solution analytique de l'équation stationnaire de Schrödinger pour la Potentiel coulombien dans l'espace non-commutatif.

et l’influence de ce dernier sur les niveaux d’énergie de l’atome d’hydrogène.

Mots clés : fonction radiale, harmoniques sphériques, moment cinétique, espace non commutative

ABSTRACT

In this work, we have presented a relation between the commutative coordinates and the so-called non-commutative coordinates (Bopp shift), and we will use this tool to apply the Schrödinger equation in a non-commutative space, and look for the analytical solution of the Schrödinger stationary equation for the Coulomb Potential in the non-commutative space.

Keywords: radial function, spherical harmonics, moment cinétique, non commutative space

ملخص

في هذا العمل، قدمنا علاقة بين الإحداثيات المألوفة في الفضاء العادي والإحداثيات في الهندسة اللاتبادلية والمعروفة باسم انزياح (Bopp shift)، واستخدمنا هذه العلاقة كوسيلة لكتابة معادلة شرود نغر في فضاء غير تبديلي ،ومنه قمنا بالبحث عن الحل التحليلي لمعادلة شرود نغر المستقرة و الخاضعة لكمون كولوم في الفضاء غير التبادلي. وتأثير هذا الأخير على سويات طاقة ذرة الهيدروجين

كلمات البحث: الدالة القطرية , التوافقات الكروية , العزم الحركي, الفضاء اللاتبادلي.