

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

UNIVERSITE MENTOURI DE CONSTANTINE
FACULTE DES SCIENCES EXACTES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre :

Série :

THESE

PRESENTEE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE DOCTORAT

EN SCIENCES PHYSIQUES

SPECIALITE : PHYSIQUE THEORIQUE

THEME

**ETUDE QUANTIQUE DE QUELQUES POTENTIELS
DEFORMES ET COMMENTAIRES**

Par

ZOUACHE AHCENE

SOUTENU LE : 22 / 11 / 2009

Devant le jury :

Président :	F. BENAMIRA	Prof. Univ. Mentouri Constantine
Rapporteur :	L. GUECHI	Prof. Univ. Mentouri Constantine
Examineurs :	K. BENCHEIKH	Prof. Univ. F. ABBAS. Setif.
	M. MAAMACHE	Prof. Univ. F. ABBAS. Setif.
	M. T. MEFTAH	Prof. Univ. De Ouargla.
	S. R. ZOUZOU	Prof Univ. Mentouri Constantine

Remerciement

J'exprime tout d'abord mes vifs remerciements à mon encadreur le Professeur L. Guechi qui m'a initié à ce travail et m'a permis, par sa patience et sa disponibilité généreuse, d'avancer et d'apprendre beaucoup de choses pendant toutes ces années.

Je remercie également le Professeur F. Benamira qui a toujours été présent et prêt à m'aider dans mon travail et d'avoir accepté de présider le jury d'examen.

Je remercie les Professeurs K. Bencheikh et M. Maamache de l'université de Setif, le Professeur M. T. Meftah de l'université de Ouargla et également le Professeur S. R. Zouzou de l'université de Constantine d'avoir accepté de juger ce travail. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma profonde gratitude.

Enfin je n'oublie pas de remercier ma mère qui n'a cessé de me suivre et de m'encourager ainsi que mon épouse et mes deux petites filles, Seifanah et Rithadj, qui me donnent de bonnes raisons pour progresser dans mon travail.

Table des matières

I	Etude quantique de quelques potentiels déformés	5
1	Potentiel à quatre paramètres pour une molécule diatomique	9
1.1	Introduction	9
1.2	Expression de l'équation différentielle radiale	11
1.3	Potentiel de Hulthén déformé	12
1.3.1	Premier cas : $\lambda \geq 1$ et $r_0 < r < +\infty$	12
1.3.2	Deuxième cas : $0 < \lambda < 1$ et $r \in \mathbb{R}^+$	15
1.4	Potentiel de Woods-Saxon déformé	16
1.5	Potentiel radial de Morse	20
1.6	Conclusion	22
2	Solutions exactes de l'équation de Schrödinger pour des états s d'une particule dans le potentiel de Manning-Rosen	23
2.1	Introduction	23
2.2	Solution de l'équation de Schrödinger radiale	25
2.3	Etats liés	27
2.4	Etats de diffusion	30
2.5	Cas particulier : le potentiel de Hulthén	31
3	Solutions exactes de l'équation de Klein-Gordon pour les états s d'une particule chargée dans des potentiels vecteur et scalaire des types Hulthén et Woods-Saxon déformés	33

3.1	Introduction	33
3.2	Equation de Klein-Gordon	34
3.3	Potentiels déformés de Woods-Saxon	35
3.4	Potentiels déformés de Hulthén	37
3.4.1	Premier cas : $0 < q < 1, r \in \mathbb{R}^+$	37
3.4.2	Deuxième cas : $q \geq 1$ et $r_0 < r < +\infty$	38
3.5	Cas particuliers	40
3.5.1	Premier cas : Potentiel de Woods-Saxon	40
3.5.2	Deuxième cas : Potentiels de Hulthén standard	41
3.5.3	Troisième cas : Potentiels exponentiels	42
3.6	Conclusion	44
4	Solution de l'équation de Klein-Gordon pour les états l d'une particule chargée dans des potentiels vecteur et scalaire de Hulthén généralisés	45
4.1	Introduction	45
4.2	Résolution de l'équation de Klein-Gordon	46
4.2.1	Validité de l'approximation	47
4.2.2	Spectre d'énergie et fonctions d'onde des états liés	47
4.3	Cas particulier : Potentiels de Hulthén standard	50
II	Commentaires	51

Première partie

Etude quantique de quelques
potentiels déformés

Introduction

Depuis la fondation de la mécanique quantique entre les années 1923 et 1927, la recherche des solutions exactes des équations d'onde, dans un cadre non relativiste ou dans un contexte relativiste, continue de susciter l'intérêt des chercheurs parallèlement au développement des modèles de potentiels proposés pour décrire des interactions nucléaires en physique nucléaire ou des interactions inter-atomiques en physique atomique ou moléculaire et en chimie quantique.

Comme exemple, nous pouvons citer en premier lieu le potentiel d'interaction entre un neutron et un proton suggéré par Yukawa [1] et utilisé par Möller et Rosenfeld [2] dans la recherche des états stationnaires d'un deuteron. Un potentiel de cette forme a été également utilisé par Bohr [3] pour analyser la diffusion de particules chargées dans des champs atomiques. L'équation de Schrödinger radiale pour cette forme de potentiel a été résolue numériquement par Wilson [4] et par Sachs et Goepfert-Mayer [5] dans le cas des ondes s , c'est à dire pour le moment angulaire $l = 0$. Hylleraas et Risberg [6] et une année plus tard Hulthén [7] proposaient une forme de potentiel dite potentiel de Hulthén dont l'importance en physique atomique était soulignée par Lindhard et Winther [8]. Une modification des potentiels mentionnés ci-dessus était utilisée par Gustavi [9], d'une part comme potentiel d'interaction de deux nucléons et d'autre part, pour discuter la solution de l'équation de Schrödinger radiale pour les états s .

Une combinaison linéaire du potentiel de Hulthén et d'une forme de la modification employée par Gustavi dans l'obtention de la solution de l'équation de Schrödinger était traitée par Rosenzweig et Krieger [10] dans leur analyse des conditions de quantification de Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin (JWKB) au moyen d'une méthode développée par N. Fröman et P. O. Fröman [11]. A l'aide de cette méthode, les valeurs exactes de l'énergie étaient calculées [10]. Infeld et Hull [12] avaient calculé les mêmes valeurs de l'énergie par la méthode de factorisa-

tion. Ce dernier potentiel peut être considéré comme une généralisation ou une déformation des potentiels suggérés dans les références [6] et [7].

Un nouveau type de déformation de certains potentiels usuels avait vu le jour récemment. Il est basé sur une q -déformation des potentiels hyperboliques introduite pour la première fois par Arai [13] dans une étude effectuée dans le cadre de la mécanique quantique supersymétrique sur une classe de potentiels invariants de forme. L'introduction du paramètre q peut servir comme un paramètre supplémentaire dans la description des interactions inter-atomiques. En particulier, dans un problème radial, l'introduction du paramètre q contraint le mouvement quantique à se produire sur un demi-axe.

L'objet de ce travail est double : d'une part, de traiter rigoureusement un ensemble de quatre systèmes dynamiques intéressant la physique théorique et la chimie quantique ; d'autre part, d'analyser les solutions du problème des états liés de ces systèmes dynamiques obtenues en utilisant l'approche de l'invariance de forme des potentiels partenaires supersymétriques ou par la méthode standard.

Ce mémoire comporte deux parties. La première partie est consacrée à la discussion des quatre systèmes mentionnés ci-dessus. Dans le chapitre 1, nous étudions un potentiel à quatre paramètres servant comme modèle de potentiel diatomique. La dépendance de ce potentiel d'un paramètre de déformation λ qui détermine la forme du potentiel, ne permet pas de traiter de façon unifiée le problème des états liés quelque soit la valeur réelle de λ . Dans le chapitre 2, nous présentons les solutions de l'équation de Schrödinger pour les états s d'une particule dans un potentiel de Manning et Rosen, qui est un potentiel généralisant le potentiel de Hulthén et celui de Kratzer. Nous donnons le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde des états liés et des états continus. Dans le chapitre 3, nous réexaminons le problème d'une particule chargée sans spin dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire dépendant d'un paramètre réel q de déformation. Lorsque $q > 0$, ces potentiels sont du type Hulthén déformé et du genre Woods-Saxon déformé pour $q < 0$. Dans le cas où $q = 0$, on a des potentiels exponentiels. Nous donnons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des états s dans chaque cas. Cette étude est étendue aux ondes l pour $q \geq 1$ dans la chapitre 4.

La seconde partie de ce travail est consacrée à une analyse critique des approches de résolution des équations de mouvement et des résultats obtenus concernant les systèmes dynamiques

mentionnés dans les chapitres précédents. Dans le premier commentaire, nous montrons que l'invariance de forme et l'approximation WKB en supersymétrie employées dans le traitement du potentiel à quatre paramètres ne s'appliquent que dans le cas où $\lambda \geq 1$ et $\frac{1}{\eta} \ln \lambda \leq r < +\infty$. Dans le second commentaire, contrairement aux arguments de Shi-Hai Dong et Garcia-Ravelo, nous prouvons l'existence des états liés uniquement lorsque le paramètre α dont dépend le potentiel de Manning et Rosen est $\alpha > 1$ ou $\alpha < 0$.

Le troisième commentaire concerne l'application de la supersymétrie pour l'étude du problème d'une particule chargée sans spin en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire du type Hulthén ou Woods-Saxon selon que le paramètre de déformation q est positif ou négatif. Nous montrons que cette méthode est applicable uniquement dans le cas où $q \geq 0$ et $\frac{1}{\alpha} \ln q < r < +\infty$. Le dernier commentaire enfin traite de la validité de l'approximation du potentiel centrifuge utilisée pour déterminer les solutions de l'équation de Klein-Gordon pour les états l du système dynamique examiné précédemment.

Ce travail a donné lieu à 4 publications internationales sous forme de commentaires.

Chapitre 1

Potentiel à quatre paramètres pour une molécule diatomique

1.1 Introduction

Le potentiel de Morse [14, 15, 16] a été très utile dans de nombreux domaines de la physique et de la chimie qui comprennent, entre autres, la physique nucléaire [17, 18], la physique moléculaire, et la chimie quantique [19]. En physique moléculaire et en chimie quantique, il sert dans l'interprétation des spectres des molécules diatomiques. En 1999, Sun [19] avait proposé un nouveau potentiel dépendant de quatre paramètres comme modèle destiné à remplacer le potentiel de Morse pour ajuster les courbes RKR (Rydberg - Klein - Rees) [20, 21, 22] expérimentales de l'énergie potentielle et pour déterminer les niveaux d'énergie des états de rotation et des états de vibration des molécules diatomiques avec une meilleure précision des résultats théoriques comparés aux données expérimentales. Le potentiel de Sun a la forme :

$$v(r) = \frac{2M}{\hbar^2} V(r) = \frac{a}{(e^{\eta r} - \lambda)^2} - \frac{b}{e^{\eta r} - \lambda}, \quad (1.1)$$

avec a, b, η , et λ des constantes définies par

$$\begin{cases} a = \frac{2M}{\hbar^2} D_e (e^\alpha - \lambda)^2, \\ b = \frac{4M}{\hbar^2} D_e (e^\alpha - \lambda), \\ \eta = \frac{\alpha}{r_e} \end{cases} \quad (1.2)$$

où D_e est la profondeur du puits de potentiel, r_e est la distance d'équilibre entre les deux noyaux et λ est le paramètre de déformation sans dimension, α est un paramètre sans dimension positif, M étant la masse réduite de la molécule.

Une analyse de ce potentiel a été présentée récemment dans le cadre de l'approche de l'invariance de forme et en utilisant l'approximation WKB en supersymétrie [23]. Cependant, nous devons signaler que les résultats obtenues dans cette étude ne sont pas satisfaisants quelque soit la valeur du paramètre λ puisque, d'une part, le potentiel (1.1) a une forte singularité au point $r = r_0 = \frac{1}{\eta} \ln \lambda$ et d'autre part les conditions aux limites ne sont pas remplies lorsque $r \rightarrow 0$, et $r \rightarrow \frac{1}{\eta} \ln \lambda$.

Comme l'approche de l'invariance de forme et l'approximation WKB ne conviennent pas pour traiter ce potentiel quelque soit les signes des paramètres P, Q et λ dont dépend le super-potentiel

$$W(r) = \frac{-\hbar}{\sqrt{2M}} \left(\frac{P}{e^{\eta r} - \lambda} + Q \right) \quad (1.3)$$

employé par Jia et ses collaborateurs dans leur calcul [24]. Nous nous proposons ici de discuter ce potentiel par l'approche de l'équation de Schrödinger en considérant toutes les formes de potentiel déterminées par le paramètre λ .

Le plan de notre discussion est le suivant : dans le second paragraphe, nous rappelons que, dans le cas d'un potentiel central, l'équation de Schrödinger indépendante du temps est remplacée par une équation différentielle où intervient la seule variable radiale r . Dans le troisième paragraphe, nous étudions le potentiel de Hulthén déformé ($\lambda > 0$) en nous limitant à deux cas. Le premier cas concerne la solution de l'équation différentielle radiale dans l'intervalle $]r_0, +\infty[$ lorsque le paramètre $\lambda \geq 1$. Nous calculons explicitement les énergies des états liés et les fonctions d'onde correspondantes normalisées. le second cas est celui pour lequel $0 < \lambda < 1$. La solution de l'équation différentielle radiale est analogue à celle obtenue dans le cas précédent, mais elle est valable dans l'intervalle \mathbb{R}^+ . En imposant les conditions aux limites, aux fonctions

d'onde obtenues, on rejette la solution inacceptable physiquement. Ceci entraîne également une condition de quantification définie par une équation transcendante qui permet de déterminer les niveaux d'énergie du système physique. Dans le quatrième paragraphe, nous analysons le potentiel de Woods-Saxon déformé lorsque le paramètre λ est choisi négatif. Une résolution analogue à celle entreprise dans le paragraphe précédent, mais en pratiquant un changement de variable approprié, nous permet d'obtenir les fonctions d'onde et de montrer que les énergies des états liés sont données par les solutions d'une équation transcendante dépendante d'une fonction hypergéométrique. Dans le cinquième paragraphe, nous abordons le potentiel de Morse radial en posant $\lambda = 0$. Nous montrons que le spectre d'énergie et les fonctions d'onde se déduisent des cas où $0 < \lambda < 1$ ou $\lambda < 0$. Enfin, le dernier paragraphe sera une conclusion.

1.2 Expression de l'équation différentielle radiale

L'équation de Schrödinger indépendante du temps pour une particule de masse M dans le potentiel (1.1) s'écrit

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2M} \Delta + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (1.4)$$

Comme le potentiel (1.1) possède la symétrie sphérique, les coordonnées polaires (r, θ, φ) sont le mieux adaptées au problème. L'équation (1.4) s'exprime donc en coordonnées sphériques ainsi

$$\left[\frac{\widehat{P}_r^2}{2M} + \frac{\widehat{L}^2}{2Mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi), \quad (1.5)$$

où \widehat{P}_r est l'opérateur radial défini par $\widehat{P}_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$, \widehat{L} est le moment cinétique orbitale et E est la valeur propre de l'Hamiltonien \widehat{H} .

Compte tenu des propriétés de commutation des opérateurs \widehat{H} , \widehat{L}^2 et \widehat{L}_z , les solutions $\psi(r, \theta, \varphi)$ de l'équation (1.5) sont forcément de la forme :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} u(r) y_l^m(\theta, \varphi), \quad (1.6)$$

avec $u(r)$ une fonction de r et $y_l^m(\theta, \varphi)$ une harmonique sphérique. En reportant l'expression

(1.6) dans l'équation (1.5) et après simplification, on obtient l'équation différentielle suivante

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} + V(r) \right] u(r) = Eu(r), \quad (1.7)$$

dont les solutions doivent remplir la condition à l'origine

$$u(0) = 0 \quad (1.8)$$

équivalente à la condition d'hermiticité de l'opérateur \widehat{P}_r , et d'être bornées à l'infini.

Pour entamer la recherche des solutions de l'équation différentielle radiale (1.7), nous devons distinguer cinq cas comme nous l'avons déjà signalé plus haut. Nous nous limiterons à l'étude de l'onde s ($l = 0$).

1.3 Potentiel de Hulthén déformé

Lorsque le paramètre de déformation λ est positif, la fonction énergie potentielle à quatre paramètres (1.1) représente une forme générale du potentiel de Hulthén [7]. Ici, nous distinguons deux cas. Si $0 < \lambda < 1$, $V(r)$ est continu sur l'intervalle entier \mathbb{R}^+ . Mais, si $\lambda \geq 1$, $V(r)$ a une forte singularité au point $r = r_0 = \frac{1}{\eta} \ln \lambda$, et dans ce cas, nous avons deux régions distinctes, une est définie par l'intervalle $]0, r_0[$ et l'autre par l'intervalle $]r_0, +\infty[$. Ceci nous amène à discuter les solutions de l'équation (1.7) dans chaque cas.

1.3.1 Premier cas : $\lambda \geq 1$ et $r_0 < r < +\infty$

Dans ce cas, nous discuterons la solution de l'équation (1.7) uniquement dans l'intervalle $]r_0, +\infty[$ puisque, dans l'autre intervalle, la solution de cette équation ne peut pas être obtenue analytiquement.

En effectuant le changement de variable défini par

$$y = \lambda e^{-\eta r}, \quad (1.9)$$

l'équation différentielle radiale (1.7) pour les états s ($l = 0$) devient

$$\left[y^2 \frac{d^2}{dy^2} + y \frac{d}{dy} + \frac{2ME}{\hbar^2 \eta^2} - \frac{a}{\eta^2 \lambda^2} \frac{y^2}{(1-y)^2} + \frac{b}{\eta^2 \lambda} \frac{y}{1-y} \right] u(r) = 0. \quad (1.10)$$

En introduisant une nouvelle fonction $\varphi(y)$ définie par la relation

$$u(r) = y^\nu (1-y)^\mu \varphi(y), \quad (1.11)$$

et en utilisant la notation

$$\begin{cases} \nu = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}}; & \mu = \frac{P}{\eta \lambda} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{\eta^2 \lambda^2}} \right), \\ \varepsilon = \sqrt{\nu^2 + \frac{a}{\eta^2 \lambda^2} + \frac{b}{\eta^2 \lambda}}; & \alpha' = \nu + \frac{P}{\eta \lambda} + \varepsilon; \quad \beta' = \nu + \frac{P}{\eta \lambda} - \varepsilon, \end{cases} \quad (1.12)$$

nous obtenons de (1.10) l'équation différentielle hypergéométrique

$$\left[y(1-y) \frac{d^2}{dy^2} + [2\nu + 1 - (\alpha' + \beta' + 1)y] \frac{d}{dy} - \alpha' \beta' \right] \varphi(y) = 0. \quad (1.13)$$

La solution générale de cette équation peut s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned} \varphi(y) = & B_1 {}_2F_1 \left(\frac{P}{\lambda \eta} + \nu - \varepsilon, \frac{P}{\lambda \eta} + \nu + \varepsilon, 2\nu + 1; y \right) + \\ & B_2 y^{-2\nu} {}_2F_1 \left(\frac{P}{\lambda \eta} - \nu - \varepsilon, \frac{P}{\lambda \eta} - \nu + \varepsilon, 1 - 2\nu; y \right). \end{aligned} \quad (1.14)$$

Pour trouver la solution acceptable physiquement de l'équation différentielle (1.10), nous devons imposer les conditions aux limites

$$\lim_{r \rightarrow r_0} u(r) = 0, \quad (1.15)$$

et

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0 \quad (1.16)$$

nécessaires pour les états liés. Lorsque $r \rightarrow \infty$, $y \rightarrow 0$ et $y^{-\nu} \rightarrow \infty$, la condition à la limite (1.16)

exige que $B_2 = 0$. Donc les deux conditions aux limites seront satisfaites si nous choisissons $B_2 = 0$ et $\frac{P}{\lambda\eta} + \nu - \varepsilon = -n_r$ avec $n_r = 0, 1, 2, \dots$. Les énergies possibles pour les états liés sont alors données par

$$E_{n_r} = -\frac{\hbar^2}{2M}Q^2. \quad (1.17)$$

En utilisant (1.11) et la formule de transformation de Gauss (voir formule (9.131.2) dans [25])

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1; 1-z) + (1-z)^{c-a-b} \\ &\quad \times \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-z), \end{aligned} \quad (1.18)$$

les fonctions d'onde peuvent s'exprimer sous la forme :

$$u(r) = B_1(1 - \lambda e^{-\eta r})^{\frac{P}{\eta\lambda}} (\lambda e^{-\eta r})^{-\frac{Q}{\eta}} {}_2F_1(-n_r, n_r + \frac{2P}{\eta\lambda} - \frac{2Q}{\eta}, \frac{2P}{\eta\lambda}; 1 - \lambda e^{-\eta r}), \quad (1.19)$$

avec

$$Q = \frac{(P + n_r\lambda\eta)^2 - a - \lambda b}{2\lambda(P + n_r\lambda\eta)}. \quad (1.20)$$

Il est clair que la fonction d'onde (1.19) remplit la condition (1.16) lorsque

$$Q < 0. \quad (1.21)$$

Donc, on peut voir de (1.20) et (1.21) que le nombre de niveaux discrets est égal à $n_{r \max}$ satisfaisant à l'égalité

$$n_{r \max} = \left\{ \frac{\sqrt{a + \lambda b} - P}{\eta\lambda} \right\}. \quad (1.22)$$

Ici $\{k\}$ signifie le plus grand entier inférieur à k .

Nous pouvons maintenant déterminer la constante de normalisation B_1 à partir de la con-

dition de normalisation

$$\int_{r_0}^{\infty} |u(r)|^2 dr = 1. \quad (1.23)$$

En utilisant le lien entre les polynômes de Jacobi et les fonctions hypergéométriques (voir formule (8.962.1) dans [25])

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(x) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \Gamma(\alpha + 1)} {}_2F_1\left(-n, n + \alpha + \beta + 1, \alpha + 1; \frac{1-x}{2}\right), \quad (1.24)$$

le calcul de l'intégrale (1.23) peut être effectué en écrivant un des 2β facteurs $\frac{1+x}{2}$ sous la forme

$$\frac{1+x}{2} = 1 - \frac{1-x}{2} \quad (1.25)$$

et en employant les deux intégrales suivantes (voir formule (7.391.5) dans [25]) :

$$\int_{-1}^{+1} (1-x)^{\nu-1} (1+x)^{\mu} \left[P_n^{(\nu, \mu)}(x) \right]^2 dx = \frac{2^{\nu+\mu} \Gamma(n + \nu + 1) \Gamma(n + \mu + 1)}{n! \nu \Gamma(n + \nu + \mu + 1)}, \quad (1.26)$$

où $Re(\nu) > 0$, et $Re(\mu) > -1$ et (voir formule (7.391.1) dans [25])

$$\int_{-1}^{+1} (1-x)^{\nu} (1+x)^{\mu} \left[P_n^{(\nu, \mu)}(x) \right]^2 dx = \frac{2^{\nu+\mu+1} \Gamma(n + \nu + 1) \Gamma(n + \mu + 1)}{n! (2n + \nu + \mu + 1) \Gamma(n + \nu + \mu + 1)}, \quad (1.27)$$

qui est valable pour $Re(\nu) > -1$, et $Re(\mu) > -1$, on montre aisément que

$$B_1 = \left[\frac{2Q(P + n_r \lambda \eta - \lambda Q) \Gamma\left(n_r + \frac{2P}{\eta \lambda}\right) \Gamma\left(n_r + \frac{2P}{\eta \lambda} - \frac{2Q}{\eta}\right)}{(P + n_r \lambda \eta) n_r! \Gamma\left(n_r - \frac{2Q}{\eta} + 1\right)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma\left(\frac{2P}{\eta \lambda}\right)}. \quad (1.28)$$

1.3.2 Deuxième cas : $0 < \lambda < 1$ et $r \in \mathbb{R}^+$

L'analyse présentée ci-dessus est valable également dans ce cas, mais nous préférons introduire la nouvelle variable $y = 1 - \lambda e^{-\eta r}$. En utilisant les conditions aux limites $u(0) = 0$ et $\lim_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0$, nous montrons, de façon identique, que la solution de l'équation différentielle radiale a la forme

$$u(r) = C_1(1 - \lambda e^{-\eta r})^{\frac{P}{\eta\lambda}} (\lambda e^{-\eta r})^\nu {}_2F_1\left(\frac{P}{\lambda\eta} + \nu - \varepsilon, \frac{P}{\lambda\eta} + \nu - \varepsilon; 2\frac{P}{\lambda\eta}; 1 - \lambda e^{-\eta r}\right), \quad (1.29)$$

où C_1 est un facteur constant. Alors, le spectre d'énergie peut être trouvé à partir d'une solution numérique de l'équation transcendante

$${}_2F_1\left(\frac{P}{\lambda\eta} + \nu - \varepsilon, \frac{P}{\lambda\eta} + \nu + \varepsilon, 2\frac{P}{\lambda\eta}; 1 - \lambda\right) = 0 \quad (1.30)$$

1.4 Potentiel de Woods-Saxon déformé

Pour $\lambda < 0$, et $r \in \mathbb{R}^+$, le potentiel de molécule diatomique (1.1) est une généralisation du potentiel de Woods-Saxon [26]. En prenant λ pour $(-\lambda)$ dans (1.1), c'est à dire le nouveau paramètre λ devient positif, et en introduisant la nouvelle variable

$$y = \frac{\lambda}{e^{\eta r} + \lambda}, \quad (1.31)$$

l'équation différentielle radiale prend la forme :

$$\left[y(1-y)\frac{d^2}{dy^2} + (1-2y)\frac{d}{dy} + \frac{2ME}{\hbar^2\eta^2} \frac{1}{y(1-y)} - \frac{a}{\lambda^2\eta^2} \frac{y}{1-y} + \frac{b}{\lambda\eta^2} \frac{1}{1-y} \right] u(r) = 0. \quad (1.32)$$

Pour résoudre cette équation différentielle, nous introduisons une nouvelle fonction $\varphi(y)$ à travers la relation

$$u(r) = y^\nu (1-y)^\mu \varphi(y). \quad (1.33)$$

En posant

$$\nu = \sqrt{-\frac{2ME}{\eta^2\hbar^2}}, \quad (1.34)$$

et

$$\mu = \sqrt{\frac{a}{\eta^2 \lambda^2} - \frac{b}{\eta^2 \lambda} - \frac{2ME}{\hbar^2 \eta^2}}, \quad (1.35)$$

l'équation en $u(r)$ se réduit à l'équation hypergéométrique suivante :

$$\left[y(1-y) \frac{d^2}{dy^2} + [2\nu + 1 - (\alpha + \beta + 1)y] \frac{d}{dy} - \alpha\beta \right] \varphi(y) = 0, \quad (1.36)$$

où

$$\alpha = \nu + \mu + \frac{P}{\lambda\eta}, \quad \beta = \nu + \mu - \frac{P}{\lambda\eta} + 1, \quad (1.37)$$

et

$$\frac{P}{\lambda\eta} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{\lambda^2 \eta^2}} \right). \quad (1.38)$$

La solution générale de l'équation différentielle (1.36) est une combinaison linéaire de deux fonctions hypergéométriques de la forme :

$$\begin{aligned} \varphi(y) = & A_1 {}_2F_1 \left(\nu + \mu + \frac{P}{\lambda\eta}, \nu + \mu - \frac{P}{\lambda\eta} + 1, 2\nu + 1; y \right) \\ & + A_2 y^{-2\nu} {}_2F_1 \left(\mu - \nu + \frac{P}{\lambda\eta}, \mu - \nu - \frac{P}{\lambda\eta} + 1, 1 - 2\nu; y \right). \end{aligned} \quad (1.39)$$

Donc on a

$$\begin{aligned} u(r) = & A_1 y^\nu (1-y)^\mu {}_2F_1 \left(\nu + \mu + \frac{P}{\lambda\eta}, \nu + \mu - \frac{P}{\lambda\eta} + 1, 2\nu + 1; y \right) \\ & + A_2 y^{-\nu} (1-y)^\mu {}_2F_1 \left(\mu - \nu + \frac{P}{\lambda\eta}, \mu - \nu - \frac{P}{\lambda\eta} + 1, 1 - 2\nu; y \right). \end{aligned} \quad (1.40)$$

Maintenant, pour que $u(r)$ soit une solution de l'équation (1.32) acceptable physiquement, elle doit satisfaire les conditions

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0, \quad (1.41)$$

$$u(0) = 0. \quad (1.42)$$

Lorsque $r \rightarrow \infty$, $y \rightarrow 0$, la condition à la limite (1.41) exige que $A_2 = 0$. Donc, suivant (1.31), la solution de l'équation de Schrödinger radiale (1.32) peut s'écrire sous la forme :

$$u(r) = C e^{\mu\eta r} \left(\frac{1}{e^{\eta r} + \lambda} \right)^{\mu+\nu} \times {}_2F_1 \left(\nu + \mu + \frac{P}{\lambda\eta}, 1 + \nu + \mu - \frac{P}{\lambda\eta}, 2\nu + 1; \frac{\lambda}{e^{\eta r} + \lambda} \right), \quad (1.43)$$

où C est un facteur constant. En utilisant le fait que la fonction hypergéométrique dans l'équation (1.43) tende vers l'unité, nous obtenons

$$u(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C e^{-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}r}. \quad (1.44)$$

Donc, nous avons obtenu le comportement asymptotique correct. Afin d'obtenir les énergies possibles des états liés, nous utilisons la condition à la limite (1.42). On voit facilement que la solution (1.43) remplit la condition (1.42) lorsque

$${}_2F_1 \left(\nu + \mu + \frac{P}{\lambda\eta}, 1 + \nu + \mu - \frac{P}{\lambda\eta}, 2\nu + 1; \frac{\lambda}{1 + \lambda} \right) = 0. \quad (1.45)$$

Il s'ensuit que les niveaux d'énergie peuvent être trouvés à partir d'une solution numérique de l'équation transcendante (1.45).

Si on pose $\lambda = qe^{\eta R}$ avec $q > 0$ dans l'expression (1.1), nous obtenons le potentiel suivant qui est une forme particulière du potentiel de Woods-Saxon déformé :

$$v_{WS}(r) = \frac{W_0}{(e^{\eta(r-R)} + q)^2} - \frac{V_0}{e^{\eta(r-R)} + q}, \quad (1.46)$$

où $V_0 = be^{-\eta R}$, $W_0 = ae^{-2\eta R}$ et $\eta R \gg 1$. Le paramètre R est le rayon nucléaire et η^{-1} est l'épaisseur de surface. Dans ce cas, nous remarquons que $\frac{\lambda}{1+\lambda} \simeq 1$ pour $\eta R \gg 1$. Grâce à la formule de Gauss (voir formule de Gauss (1.18)), il est facile de montrer que la condition de quantification pour les états liés (1.45) prend la forme suivante :

$$\frac{\Gamma(2\mu)\Gamma\left(1+\nu-\frac{P}{\lambda\eta}-\mu\right)\Gamma\left(\nu+\frac{P}{\lambda\eta}-\mu\right)}{\Gamma(-2\mu)\Gamma\left(1+\nu-\frac{P}{\lambda\eta}+\mu\right)\Gamma\left(\nu+\frac{P}{\lambda\eta}+\mu\right)}\left(\frac{e^{-\eta R}}{q}\right)^{-2\mu}=-1. \quad (1.47)$$

Pour simplifier la discussion de cette équation (1.47), nous considérons uniquement le cas où $\mu^2 < 0$, de telle sorte que suivant l'équation (1.35), μ devient purement imaginaire. En posant

$$\mu = i\beta, \quad (1.48)$$

et en définissant ϕ_1, ϕ_2 et ψ ainsi

$$\begin{cases} \phi_1 = \arg \Gamma\left(\nu + \frac{P}{\lambda\eta} + i\beta\right), \\ \phi_2 = \arg \Gamma\left(\nu - \frac{P}{\lambda\eta} + i\beta\right), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\beta), \end{cases} \quad (1.49)$$

nous pouvons aussi exprimer (1.47) sous la forme

$$\exp\left[2i\psi - 2i\phi_1 - 2i\phi_2 - 2i \arctan\left(\frac{\beta}{\nu - \frac{P}{\eta\lambda}}\right)\right]\left(\frac{e^{-\eta R}}{q}\right)^{-2i\beta} = -1. \quad (1.50)$$

Ceci conduit à la condition de quantification

$$\beta(\eta R + \ln q) + \psi - \phi_1 - \phi_2 - \arctan\left(\frac{\beta}{\nu - \frac{P}{\eta\lambda}}\right) = (2n + 1)\frac{\pi}{2}, \quad (1.51)$$

avec $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

En posant $a = 0$ et $q = 1$, le potentiel (1.46) se réduit au potentiel standard de Woods-Saxon [16]. La condition de quantification peut être déduite à partir de l'équation (1.47),

$$\beta\eta R + \psi - 2\phi - \arctan\left(\frac{\beta}{\nu}\right) = (2n + 1)\frac{\pi}{2}, \quad (1.52)$$

où

$$\begin{cases} \beta = \frac{1}{\eta}\sqrt{V_0 + \frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \phi = \arg \Gamma(\nu + i\beta), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\beta), \end{cases} \quad (1.53)$$

et $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Ce dernier résultat est en accord avec celui de la littérature [16].

1.5 Potentiel radial de Morse

En faisant $\lambda = 0$ dans l'expression (1.1), nous obtenons le potentiel de Morse radial

$$v_M(r) = ae^{-2\eta r} - be^{-\eta r} \quad (1.54)$$

où les paramètres a , b , et η sont définis respectivement par $a = \frac{2M}{\hbar^2} D e^{2\alpha r_e}$, $b = \frac{4M}{\hbar^2} D e^{\alpha r_e}$, et $\eta = \alpha$.

Dans ce cas, on peut voir à partir des équations (1.12) que

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{P}{\eta\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{a}}{\eta\lambda}, \\ \frac{P}{\eta\lambda} + \nu + \varepsilon \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \nu + \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} + \frac{2\sqrt{a}}{\eta\lambda}, \\ \frac{P}{\eta\lambda} + \nu - \varepsilon \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \nu - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}}. \end{array} \right. \quad (1.55)$$

En tenant compte de la relation (voir formule (9.122.1) dans [25])

$${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; 1) = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha)\Gamma(\gamma - \beta)}; \quad (1.56)$$

valable pour $Re(\gamma) > Re(\alpha + \beta)$, on a à partir de l'équation transcendante (1.30),

$${}_2F_1\left(\frac{P}{\lambda\eta} + \nu - \varepsilon, \frac{P}{\lambda\eta} + \nu - \varepsilon; 2\frac{P}{\lambda\eta}; 1 - \lambda\right) = \frac{\Gamma(-2\nu)}{\Gamma(\frac{1}{2} - \nu - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}})} = 0. \quad (1.57)$$

D'où il résulte (la fonction d'Euler $\Gamma(-n_r)$ est infinie)

$$\frac{1}{2} - \nu - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} = -n_r; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.58)$$

comme il était à prévoir. cette expression (1.58) représente la condition de quantification qui permet le calcul des niveaux d'énergie. On trouve

$$E_{n_r} = -\frac{\hbar^2\eta^2}{2M} \left(\frac{b}{2\eta\sqrt{a}} - n_r - \frac{1}{2}\right)^2; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (1.59)$$

D'autre part, en se servant de la formule [27]

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta}\right) = {}_1F_1(\alpha, \gamma; z), \quad (1.60)$$

il est facile de montrer que, dans le cas limite où $\lambda \rightarrow 0$, les fonctions d'onde (1.29) deviennent

$$u(r) = C \exp\left[\left(n_r - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} + \frac{1}{2}\right)r\right] \exp\left(-\frac{\sqrt{a}}{\eta}e^{-\eta r}\right) {}_1F_1\left(-n_r, 2\sqrt{-\frac{2ME_{n_r}}{\hbar^2\eta^2}} + 1; \frac{2\sqrt{a}}{\eta}e^{-\eta r}\right), \quad (1.61)$$

avec $n_r = 0, 1, 2, \dots, n_{rmax}$. Pour déterminer le nombre d'états liés n_{rmax} ; on considère le comportement asymptotique

$$u(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \exp\left[\left(n_r - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} + \frac{1}{2}\right)r\right]. \quad (1.62)$$

En tenant compte de la condition à la limite (1.41), il résulte que

$$n_{rmax} = \left\{ \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} - \frac{1}{2} \right\}, \quad (1.63)$$

où $\left\{ \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} - \frac{1}{2} \right\}$ désigne le plus grand entier inférieur à $\frac{b}{2\eta\sqrt{a}} - \frac{1}{2}$. Le spectre d'énergie (1.59) et les fonctions d'onde (1.61) peuvent également être obtenus d'une autre façon. En partant de l'équation transcendante (1.45) et des fonctions d'onde (1.43) et en prenant la limite $\lambda \rightarrow 0$, nous aurons :

$$\left\{ \begin{array}{l} P \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \sqrt{a} \\ \nu + \mu + \frac{P}{\eta\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{2\sqrt{a}}{\eta\lambda} \\ 1 + \nu + \mu - \frac{P}{\eta\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} + \nu \end{array} \right. \quad (1.64)$$

et donc, en utilisant les formules (1.56) et (1.57), nous retrouvons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des molécules diatomiques dans le potentiel de Morse radial.

1.6 Conclusion

Nous avons discuté rigoureusement le problème du potentiel à quatre paramètres adopté comme modèle pour décrire une molécule diatomique. Nous avons montré que la solution de l'équation de Schrödinger dépend du paramètre de déformation λ et donc, une solution unifiée est impossible à envisager contrairement à ce qui est rapporté dans l'étude présentée par Jia et ses collaborateurs [23] à l'aide de l'approche de l'invariance de forme et aussi au moyen d'un traitement dans le cadre de l'approximation WKB supersymétrique. Il y a lieu de remarquer que l'approche de l'invariance de forme et l'approximation WKB supersymétrique conviennent uniquement dans le cas où $\lambda \geq 1$ et $r \in \left] \frac{1}{\eta} \ln \lambda, +\infty \right[$. Par contre, le problème est insoluble dans le cadre de ses deux approches lorsque $0 < \lambda < 1$ ou $\lambda < 0$. Dans ces deux cas, les niveaux d'énergie sont donnés par une équation transcendante impliquant une fonction hypergéométrique.

Chapitre 2

Solutions exactes de l'équation de Schrödinger pour des états s d'une particule dans le potentiel de Manning-Rosen

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous nous proposons de résoudre en toute rigueur l'équation de Schrödinger d'une particule de masse μ interagissant avec une autre particule par l'intermédiaire d'un potentiel effectif central qui peut être considéré comme une généralisation du potentiel de Hulthén [7]. Ce potentiel est défini par

$$v(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu b^2} \left[\frac{\alpha(\alpha - 1)}{(e^{\frac{r}{b}} - 1)^2} - \frac{A}{e^{\frac{r}{b}} - 1} \right], \quad (2.1)$$

où A , b et α sont des constantes. Le paramètre b caractérise la portée du potentiel. Lorsque $\alpha = 0$ ou $\alpha = 1$, il se réduit au potentiel de Hulthén. Il admet une valeur minimum au point $r_0 = b \ln \left[1 + \frac{2\alpha(\alpha-1)}{A} \right]$ donnée par

$$V(r_0) = -\frac{\hbar^2 A^2}{8\mu b^2 \alpha(\alpha - 1)}, \quad (2.2)$$

pour $\alpha < 0$ ou $\alpha > 1$.

Ce potentiel effectif est une forme dite de Manning et Rosen [28] qui étaient les premiers à donner les valeurs propres et à esquisser des expressions pour les fonctions propres non normalisées relatives à un potentiel équivalent à l'expression (2.1) en 1933. Le potentiel de Manning et Rosen est utilisé dans la description des vibrations et de la rotation des molécules diatomiques et constitue un modèle convenable pour d'autres situations physiques dans le calcul des états de diffusion et des états liés [8].

Lorsque $\frac{r}{b} \ll 1$, le potentiel de Manning et Rosen se comporte comme le potentiel dit de Kratzer [16] ($\hbar = \mu = 1$, $Ab = B$)

$$V_K(r) = \frac{1}{2} \left[\frac{\alpha(\alpha - 1)}{r^2} - \frac{B}{r} \right], \quad (2.3)$$

qui possède un minimum au point $r_0 = \frac{2\alpha(\alpha-1)}{bA}$. D'autre part, en développant $V_K(r)$ autour du point r_0 , nous obtenons

$$V_K(r) \approx -\frac{B^2}{8\alpha(\alpha - 1)} + \frac{1}{2}\omega^2(r - r_0)^2, \quad (2.4)$$

où

$$\omega = \frac{B^2}{[2\alpha(\alpha - 1)]^{\frac{3}{2}}}, \quad (2.5)$$

est la pulsation classique des petites vibrations harmoniques. Puisque ω doit être un réel positif, il s'ensuit que

$$\alpha < 0, \text{ ou } \alpha > 1. \quad (2.6)$$

Dans un papier récent, Dong et Garcia-Ravelo [29] ont discuté, par la résolution de l'équation de Schrödinger, les solutions des états liés des ondes s . Leurs résultats sont incorrects pour $\alpha = 0$. En effet, d'une part, en faisant $n = 0$, la valeur de l'énergie n'est pas finie. D'autre part,

les fonctions d'onde radiales ne remplissent pas la condition à la limite $R_{E,0}(0) = 0$ et d'une manière générale, elles ne sont pas convenablement normalisées. Par conséquent il est utile de réexaminer le problème dans l'approche de l'équation de Schrödinger. Le traitement général des états s est donné dans le paragraphe 2.2. Le paragraphe 2.3 est consacré à l'étude des états liés ($E < 0$). Nous en déduisons le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde. Dans le paragraphe 2.4, nous abordons le problème des états de diffusion ($E > 0$) pour l'obtention des déphasages produits par le potentiel dans l'onde s ($l = 0$). Enfin, dans le dernier paragraphe, en fixant $\alpha = 0$ ou $\alpha = 1$, nous considérons le potentiel de Hulthén standard.

2.2 Solution de l'équation de Schrödinger radiale

Pour trouver les valeurs propres et les fonctions propres convenablement normalisées correspondantes pour $\alpha < 0$ ou $\alpha > 1$, commençons par écrire l'équation de Schrödinger radiale pour $l = 0$,

$$\frac{d^2}{dr^2} R_{E,0}(r) - \frac{1}{b^2} \left[\frac{\alpha(\alpha - 1)}{(e^{\frac{r}{b}} - 1)^2} - \frac{A}{e^{\frac{r}{b}} - 1} \right] R_{E,0}(r) + 2ER_{E,0}(r) = 0, \quad (2.7)$$

où nous avons utilisé un système d'unités pour lequel la masse réduite μ et la constante de Planck \hbar satisfont $\mu = \hbar = 1$.

Introduisons la nouvelle variable

$$z = e^{-\frac{r}{b}}, \quad (2.8)$$

et en notant

$$\lambda = \sqrt{-2b^2 E}, \quad (2.9)$$

cherchons des solutions sous la forme

$$R_{E,0}(r) = (1 - z)z^\lambda F(z). \quad (2.10)$$

Alors, en substituant (2.8), (2.9), (2.10) dans (2.7) et en imposant sur β la condition :

$$\beta(\beta - 1) = \alpha(\alpha - 1), \text{ c'est à dire } \beta = \alpha \text{ ou } \beta = (1 - \alpha), \quad (2.11)$$

l'équation différentielle hypergéométrique suivante en $F(z)$ est obtenue

$$z(1-z)\frac{d^2}{dr^2}F(z) + [2\lambda + 1 - (2\lambda + 2\beta + 1)z]\frac{d}{dr}F(z) - [\beta(2\lambda + 1) - A]F(z) = 0. \quad (2.12)$$

En comparant cette équation avec la forme générale de l'équation différentielle hypergéométrique

$$z(1-z)\frac{d^2}{dr^2}F(z) + [c - (a + b + 1)z]\frac{d}{dr}F(z) - abF(z) = 0, \quad (2.13)$$

on trouve pour les paramètres les valeurs :

$$c = 2\lambda + 1, \quad a = \beta + \lambda - \gamma, \quad b = \beta + \lambda + \gamma, \quad (2.14)$$

où

$$\gamma = \sqrt{A + \beta(\beta - 1) + \lambda^2}. \quad (2.15)$$

La solution générale de l'équation différentielle (2.9) est alors donnée par

$$\begin{aligned} F(z) &= C_1 {}_2F_1(\beta + \lambda - \gamma, \beta + \lambda + \gamma, 2\lambda + 1; z) \\ &\quad + C_2 z^{-2\lambda} {}_2F_1(\beta - \lambda - \gamma, \beta - \lambda + \gamma, 1 - 2\lambda; z). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Pour trouver la solution acceptable physiquement de l'équation différentielle (2.7), nous devons imposer la condition à la limite

$$R_{E,0}(0) = 0. \quad (2.17)$$

Afin d'étudier le comportement de la fonction $F(z)$ pour $z \rightarrow 1$, c'est à dire $r \rightarrow 0$, nous ferons

intervenir la relation fonctionnelle qui se déduit de

$$\begin{aligned}
{}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1; 1-z) + (1-z)^{c-a-b} \\
&\quad \times \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-z),
\end{aligned} \tag{2.18}$$

en remplaçant c par $a+b-c+1$ et z par $1-z$, la solution de (2.13) peut s'écrire

$$F(z) = N {}_2F_1(\beta + \lambda - \gamma, \beta + \lambda + \gamma, 2\beta; 1-z) \tag{2.19}$$

où N est un facteur constant. La fonction d'onde satisfaisant les équations (2.7), (2.12) et (2.17) est donc donnée par (2.10) et (2.19) ainsi

$$R_{E,0}(r) = N (1 - e^{-\frac{r}{b}})^\beta e^{-\sqrt{-2E}r} {}_2F_1\left(\beta + \lambda - \gamma, \beta + \lambda + \gamma, 2\beta; 1 - e^{-\frac{r}{b}}\right), \tag{2.20}$$

avec $\beta \geq 1$. Deux cas sont à considérer selon que $E < 0$ ou $E > 0$.

2.3 États liés

Il est évident que le spectre d'énergie est discret pour $E < 0$. Dans ce cas $\sqrt{-2E}$ est un paramètre positif. Pour trouver la solution acceptable physiquement pour le problème des états liés, nous devons imposer la condition à la limite

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_{E,0}(r) = 0. \tag{2.21}$$

En utilisant la formule de transformation de Gauss (2.18) on montre que

$$R_{E,0}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \left(1 - e^{-\frac{r}{b}}\right)^\beta \times \left\{ \frac{\Gamma(2\beta)\Gamma(-2\lambda)}{\Gamma(\beta - \lambda + \gamma)\Gamma(\beta - \lambda - \gamma)} e^{-\sqrt{-2E}r} + \frac{\Gamma(2\beta)\Gamma(2\lambda)}{\Gamma(\beta + \lambda - \gamma)\Gamma(\beta + \lambda + \gamma)} e^{\sqrt{-2E}r} \right\} \quad (2.22)$$

Ce comportement asymptotique remplit la condition (2.21) lorsque

$$\beta + \lambda - \gamma = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (2.23)$$

où n_r est le nombre de noeuds de la fonction d'onde radiale. Les valeurs propres de l'énergie seront alors données par

$$E_{n_r} = -\frac{1}{8b^2} \left[\frac{A + \beta(\beta - 1)}{n_r + \beta} - (n_r + \beta) \right]^2, \quad (2.24)$$

et les fonctions propres correspondantes par

$$R_{E,0}(r) = C \left(1 - e^{-\frac{r}{b}}\right)^\beta e^{-\frac{\lambda_{n_r}}{b}r} {}_2F_1 \left(-n_r, n_r + 2\lambda_{n_r} + 2\beta, 2\lambda_{n_r} + 1; e^{-\frac{r}{b}} \right), \quad (2.25)$$

où $\lambda_{n_r} = \sqrt{-2b^2 E_{n_r}}$ et $\gamma_{n_r} = \sqrt{A + \beta(\beta - 1) + \lambda_{n_r}^2}$. A partir des équations (2.9) et (2.24) et en rappelant que nous avons choisi λ positif il s'ensuit que

$$\frac{A + \beta(\beta - 1)}{n_r + \beta} - (n_r + \beta) > 0. \quad (2.26)$$

Alors, on peut voir de l'équation (2.26) que n_r est un entier positif ou nul qui vérifie l'inégalité

$$0 \leq n_r \leq \left\{ \sqrt{A + \beta(\beta - 1)} - \beta \right\}. \quad (2.27)$$

$n_{rmax} = \left\{ \sqrt{A + \beta(\beta - 1)} - \beta \right\}$ étant le plus grand entier plus petit que $\sqrt{A + \beta(\beta - 1)} - \beta$. Ainsi, suivant les conditions sur le paramètre α , les énergies possibles pour les états liés et les fonctions d'ondes radiales correspondantes s'écrivent explicitement, pour $\alpha > 1$:

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{n_r} = -\frac{1}{8b^2} \left[\frac{A-\alpha}{n_r+\alpha} - \frac{n_r(n_r+2\alpha)}{n_r+\alpha} \right]^2, n_r = 0, 1, 2, \dots, n_{rmax} = \left\{ \sqrt{A + \alpha(\alpha - 1)} - \alpha \right\}, \\ R_{n_r,0}(r) = C_{n_r} (1 - e^{-\frac{r}{b}})^\alpha e^{-\frac{\lambda_{n_r}}{b}r} {}_2F_1 \left(-n_r, n_r + 2\lambda_{n_r} + 2\alpha, 2\lambda_{n_r} + 1; e^{-\frac{r}{b}} \right), \end{array} \right. \quad (2.28)$$

et pour $\alpha < 0$

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{n_r} = -\frac{1}{8b^2} \left[\frac{A+\alpha-1}{n_r-\alpha+1} - \frac{n_r[n_r+2(1-\alpha)]}{n_r-\alpha+1} \right]^2, n_r = 0, 1, 2, \dots, n_{rmax} = \left\{ \sqrt{A + \alpha(\alpha - 1)} + \alpha \right\}, \\ R_{n_r,0}(r) = C_{n_r} (1 - e^{-\frac{r}{b}})^{1-\alpha} e^{-\frac{\lambda_{n_r}}{b}r} {}_2F_1 \left(-n_r, n_r + 2\lambda_{n_r} - 2\alpha + 2, 2\lambda_{n_r} + 1; e^{-\frac{r}{b}} \right), \end{array} \right. \quad (2.29)$$

où la constante de normalisation C_{n_r} résulte de la condition

$$\int_0^\infty |R_{n_r,0}(r)|^2 dr = 1. \quad (2.30)$$

Pour exprimer C_{n_r} sous forme compacte, on utilise le lien entre la fonction hypergéométrique et les polynômes de Jacobi (voir la formule (8.962.1) dans [25])

$${}_2F_1\left(-n, n + \nu + \mu + 1, \nu + 1; \frac{1-x}{2}\right) = \frac{n!\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(n+\nu+1)} P_n^{(\nu,\mu)}(x). \quad (2.31)$$

Les fonctions radiales dans (2.28) ou (2.29) peuvent s'écrire sous la forme :

$$R_{n_r,0}(r) = C_{n_r} \frac{n_r!\Gamma(2\lambda_{n_r}+1)}{\Gamma(n_r+2\lambda_{n_r}+1)} (1 - e^{-\frac{r}{b}})^\beta e^{-\frac{\lambda_{n_r}}{b}r} P_n^{(2\lambda_{n_r}, 2\beta-1)}(1 - 2e^{-\frac{r}{b}}). \quad (2.32)$$

Sous le changement de coordonnée $x = 1 - 2e^{-\frac{r}{b}}$, la constante de normalisation C_{n_r} dans (2.32) est donnée par

$$C_{n_r}^{-2} = \frac{b}{2} \left[\frac{n_r!\Gamma(2\lambda_{n_r}+1)}{\Gamma(n_r+2\lambda_{n_r}+1)} \right]^2 \int_{-1}^1 \left(\frac{1-x}{2} \right)^{2\lambda_{n_r}-1} \left(\frac{1+x}{2} \right)^{2\beta} \left[P_n^{(2\lambda_{n_r}, 2\beta-1)}(x) \right]^2 dx. \quad (2.33)$$

Le calcul de cette intégrale peut être effectué en écrivant un des 2β facteurs ($\frac{1+x}{2}$) sous la forme :

$$\frac{1+x}{2} = 1 - \frac{1-x}{2} \quad (2.34)$$

et en utilisant les deux intégrales suivantes (voir formule (7.391.5) dans [25]) :

$$\int_{-1}^1 (1-x)^{\nu-1} (1+x)^{\mu} \left[P_n^{(\nu,\mu)}(x) \right]^2 dx = \frac{2^{\nu+\mu} \Gamma(n+\nu+1) \Gamma(n+\mu+1)}{n! \nu \Gamma(n+\nu+\mu+1)}, \quad (2.35)$$

où $Re(\nu) > 0$, et $Re(\mu) > -1$, et (voir formule (7.391.1) dans [25])

$$\int_{-1}^1 (1-x)^{\nu} (1+x)^{\mu} \left[P_n^{(\nu,\mu)}(x) \right]^2 dx = \frac{2^{\nu+\mu+1} \Gamma(n+\nu+1) \Gamma(n+\mu+1)}{n! (2n+\nu+\mu+1) \Gamma(n+\nu+\mu+1)}, \quad (2.36)$$

qui est valable pour $Re(\nu) > -1$, et $Re(\mu) > -1$. On trouve finalement que

$$C_{n_r} = \left[\frac{2 \lambda_{n_r} (n_r + \lambda_{n_r} + \beta) \Gamma(n_r + 2\lambda_{n_r} + 1) \Gamma(n_r + 2\lambda_{n_r} + 2\beta)}{b \frac{n_r + \beta}{n_r + \beta} n_r! \Gamma(n_r + 2\beta)} \right]^{\frac{1}{2}} \times \frac{1}{\Gamma(2\lambda_{n_r} + 1)}. \quad (2.37)$$

2.4 Etats de diffusion

Lorsque $E > 0$, le spectre de l'énergie est continu. Il résulte de (2.9) et (2.15) que

$$\lambda = ibk, \quad \gamma = \sqrt{A + \beta(\beta - 1) - b^2 k^2}. \quad (2.38)$$

Dans ce cas, le comportement asymptotique (2.22) de la fonction d'onde s'écrit :

$$\begin{aligned} R_{k,0}(r) &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} N \Gamma(2\beta) \left\{ \frac{\Gamma(-2ibk)}{\Gamma(\beta - ibk + \gamma) \Gamma(\beta - ibk - \gamma)} e^{-ikr} + \frac{\Gamma(2ibk)}{\Gamma(\beta + ibk + \gamma) \Gamma(\beta + ibk - \gamma)} e^{ikr} \right\} \\ &= 2N \Gamma(2\beta) \left| \frac{\Gamma(2ibk)}{\Gamma(\beta + ibk + \gamma) \Gamma(\beta + ibk - \gamma)} \right| \cos \left(kr + \arg \frac{\Gamma(2ibk)}{\Gamma(\beta + ibk + \gamma) \Gamma(\beta + ibk - \gamma)} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 2N \Gamma(2\beta) \left| \frac{\Gamma(2ibk)}{\Gamma(\beta + ibk + \gamma)\Gamma(\beta + ibk - \gamma)} \right| \\
&\quad \times \sin \left(kr + \frac{\pi}{2} + \arg \frac{\Gamma(2ibk)}{\Gamma(\beta + ibk + \gamma)\Gamma(\beta + ibk - \gamma)} \right). \tag{2.39}
\end{aligned}$$

Ainsi, nous avons obtenu le comportement asymptotique correct pour des valeurs grandes de r . De (2.39), nous pouvons d eduire le d ephaseage δ_0 des ondes s

$$\delta_0 = \frac{\pi}{2} + \arg \frac{\Gamma(2ibk)}{\Gamma(\beta + ibk + \gamma)\Gamma(\beta + ibk - \gamma)}. \tag{2.40}$$

2.5 Cas particulier : le potentiel de Hulth en

Quand $\alpha = 0$ ou $\alpha = 1$, le potentiel de Marnning-Rosen (2.1) se r eduit au potentiel de Hulth en standard

$$V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu b^2} \frac{A}{e^{\frac{r}{b}} - 1}. \tag{2.41}$$

En posant $\beta = 1$, le spectre d' energie et les fonctions d'onde normalis ees sont d eduits de (2.24) et (2.32), respectivement

$$E_{n_r} = -\frac{1}{8b^2} \left[\frac{A}{n_r + 1} - (n_r + 1) \right]^2; n_r = 0, 1, 2, \dots, n_{rmax} = \left\{ \sqrt{A} - 1 \right\}, \tag{2.42}$$

$$\begin{aligned}
R_{n_r,0}(r) &= \left[\frac{2}{b} \lambda_{n_r} (n_r + \lambda_{n_r} + 1) (n_r + 2\lambda_{n_r} + 1) \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\Gamma(n_r + 2\lambda_{n_r} + 1)}{(n_r + 1)! \Gamma(2\lambda_{n_r} + 1)} \\
&\quad \times (1 - e^{-\frac{r}{b}}) e^{-\frac{\lambda_{n_r}}{b} r} {}_2F_1 \left(-n_r, n_r + 2\lambda_{n_r} + 2\beta, 2\lambda_{n_r} + 1; e^{-\frac{r}{b}} \right). \tag{2.43}
\end{aligned}$$

En utilisant la formule de transformation de Gauss (2.18), on voit facilement que si on pose $2\lambda_{n_r} = p_n$, $b = a$ et $n_r + 1 = n$, on retrouve les resultats obtenus par l'approche de l'int egrale de chemin [30] sur la vari et e SU(2) ou  a travers la r esolution de l' equation de Schr odinger [16].

Egalement, les fonctions d'onde relatives au spectre continu sont

$$\begin{aligned}
R_{k,0}(r) &= N(1 - e^{-\frac{r}{b}})e^{-ikr} \\
&\quad \times {}_2F_1\left(1 + ibk - \sqrt{A - b^2k^2}, 1 + ibk + \sqrt{A - b^2k^2}, 2; 1 - e^{-\frac{r}{b}}\right)
\end{aligned}
\tag{2.44}$$

avec $E = \frac{\hbar^2k^2}{2\mu}$.

Les déphasages correspondants sont donnés par

$$\delta_0 = \frac{\pi}{2} + \arg \frac{\Gamma(2ibk)}{\Gamma(1 + ibk + \sqrt{A - b^2k^2})\Gamma(1 + ibk - \sqrt{A - b^2k^2})}.
\tag{2.45}$$

Chapitre 3

Solutions exactes de l'équation de Klein-Gordon pour les états s d'une particule chargée dans des potentiels vecteur et scalaire des types Hulthén et Woods-Saxon déformés

3.1 Introduction

Il y a une littérature très abondante sur l'utilisation du potentiel de Hulthén [6, 7] comme approximation du potentiel d'interaction entre deux corps dans de nombreux domaines de la physique, entre autres la physique nucléaire [31], la physique atomique [33] et la physique moléculaire [34].

Durant ces dernières années, il y a eu un regain d'intérêt pour la recherche des solutions exactes de l'équation de Klein-Gordon avec des potentiels vecteur et scalaire dont la forme est une modification du potentiel de Hulthén ou de celui de Woods-Saxon [26] en utilisant des techniques de résolution différentes. Le problème d'une particule chargée dans des potentiels vecteur et scalaire standard de Hulthén a été étudié à travers la résolution de l'équation de

Klein-Gordon [35] pour les états s et dans le cadre de l'intégrale de chemin [36]. L'équation de Klein-Gordon avec un potentiel vecteur de Hulthén déformé a été résolue en utilisant la méthode de Nikiforov-Uvarov [37]. Nous pouvons citer aussi le travail [38] sur le potentiel scalaire de Hulthén déformé dans la même approche. En outre les solutions des états s de l'équation de Klein-Gordon avec des potentiels vecteur et scalaire du type Hulthén modifié ont été obtenues dans l'approche de la mécanique quantique supersymétrique [39] et par la méthode d'itération asymptotique [40]. Il faut signaler que les études réalisées dans les références [37, 38, 39, 40] sont partiellement satisfaisantes.

L'objet de ce chapitre est de réexaminer ce problème rigoureusement en gérant l'équation de Klein-Gordon dans sa totalité.

3.2 Equation de Klein-Gordon

Considérons l'équation de Klein-Gordon indépendante du temps qui définit le mouvement d'une particule sans spin de charge $-e$ ($e > 0$) et de masse M dans un champ à symétrie centrale constitué d'un potentiel vecteur $V_q(r)$ et d'un potentiel scalaire $S_q(r)$ de la forme

$$V_q(r) = -\frac{V_0}{e^{\alpha r} - q}, \quad S_q(r) = -\frac{S_0}{e^{\alpha r} - q} \quad (3.1)$$

où α , S_0 et V_0 sont des constantes positives telles que $S_0 > V_0$ et q est un paramètre de déformation qui peut prendre toute valeur réelle. Dans un système d'unité où la constante de Planck \hbar et la vitesse de la lumière c sont égales à l'unité, l'équation de Klein-Gordon s'écrit

$$\left[\Delta + (E - V_q(r))^2 - (M + S_q(r))^2 \right] \psi(r, \theta, \varphi) = 0. \quad (3.2)$$

Comme $V_q(r)$ et $S_q(r)$ sont des potentiels à symétrie sphérique, il convient de chercher les solutions particulières de l'équation (3.2) par séparation des variables en coordonnées sphériques, en posant

$$\psi_{nr,l,m}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} u_l(r) y_l^m(\theta, \varphi), \quad (3.3)$$

où $y_l^m(\theta, \varphi)$ est une fonction harmonique sphérique. En substituant l'expression (3.3) dans l'équation (3.2), il vient

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + (E - V_q(r))^2 - (M + S_q(r))^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0. \quad (3.4)$$

Il est clair que cette équation différentielle n'admet aucune solution exacte pour les états de moment cinétique orbital l différent de zéro à cause du terme centrifuge. Les solutions de cette équation peuvent être trouvées uniquement pour les ondes s ($l = 0$) dans le cas des potentiels de Hulthén ou de Woods-Saxon déformés. Avant de passer à la résolution de l'équation différentielle (3.4), il faut remarquer que l'allure des potentiels $V_q(r)$ et $S_q(r)$ dépend du paramètre de déformation q . Pour $q < 0$, $V_q(r)$ et $S_q(r)$ sont continus sur tout l'intervalle $]0, +\infty[$ et pour $q > 0$, deux cas peuvent se présenter. Si $0 < q < 1$, $V_q(r)$ et $S_q(r)$ sont continus sur tout l'intervalle $]0, +\infty[$. Mais si $q \geq 1$, $V_q(r)$ et $S_q(r)$ présentent une forte singularité au point $r = r_0 = \frac{1}{\alpha} \ln q$ et dans ce cas, nous avons deux régions distinctes, l'une définie par l'intervalle $]0, r_0[$ et l'autre par l'intervalle $]r_0, +\infty[$. Ceci nous amène à résoudre l'équation différentielle (3.4) pour $l = 0$ dans les quatre intervalles et suivant les valeurs de q correspondantes séparément. Le cinquième cas concerne la valeur $q = 0$. Il peut être considéré comme un cas limite.

3.3 Potentiels déformés de Woods-Saxon

Pour $q < 0$ et $r \in \mathbb{R}^+$, les potentiels (3.1) sont des formes générales du potentiel de Woods-Saxon. Pour résoudre l'équation différentielle radiale (3.4), dans le cas où $l = 0$, faisons le changement de variable

$$y = \frac{q}{q - e^{\alpha r}}, \quad (3.5)$$

et cherchons une solution de la forme

$$u_0(r) = y^Q (1 - y)^\mu \varphi(y), \quad (3.6)$$

qui doit être finie en tout point et nulle à l'infini et à l'origine. Elle doit donc vérifier les conditions aux limites

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_0(r) = 0 \quad (3.7)$$

et

$$u_0(0) = 0 \quad (3.8)$$

pour qu'elle soit admissible physiquement. Ceci entraîne à choisir les paramètres Q et μ des quantités positives.

En utilisant (3.5) et (3.6) dans (3.4) et en définissant

$$\mu = \frac{1}{\alpha} \sqrt{Q^2 + \frac{\beta}{q\alpha^2} + \frac{\gamma}{q^2\alpha^2}} \quad (3.9)$$

avec

$$Q = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M^2 - E^2}; \quad \beta = 2(EV_0 + MS_0); \quad \gamma = S_0^2 - V_0^2, \quad (3.10)$$

nous obtenons l'équation différentielle hypergéométrique suivante :

$$\left[y(1-y) \frac{d^2}{dy^2} + [2Q+1 - (2Q+2\mu+2)y] \frac{d}{dy} - (Q+\mu+P)(1+Q+\mu-P) \right] \varphi(y) = 0, \quad (3.11)$$

où

$$P = \frac{A}{q\alpha} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\gamma}{q^2\alpha^2}} \right). \quad (3.12)$$

La solution de cette équation, qui remplit la condition à la limite (3.7), peut s'écrire

$$\varphi(y) = N {}_2F_1 \left(Q + \mu + P, 1 + Q + \mu - P, 2Q + 1; \frac{q}{q - e^{\alpha r}} \right), \quad (3.13)$$

où N est un facteur constant. Donc, suivant (3.5), la solution de l'équation de Klein-Gordon radiale (3.4), pour $l = 0$, est donnée par (3.6) et (3.11) ainsi

$$u_0(r) = N \left(\frac{q}{q - e^{\alpha r}} \right)^Q \left(\frac{e^{\alpha r}}{e^{\alpha r} - q} \right)^\mu {}_2F_1 \left(Q + \mu + P, 1 + Q + \mu - P, 2Q + 1; \frac{q}{q - e^{\alpha r}} \right). \quad (3.14)$$

Afin de déterminer les énergies possibles des états liés, nous utilisons la condition à la limite (3.8). La solution (3.14) remplit la condition (3.8) lorsque

$${}_2F_1 \left(Q + \mu + P, 1 + Q + \mu - P, 2Q + 1; \frac{q}{q - 1} \right) = 0. \quad (3.15)$$

On trouve donc une équation transcendante comprenant une fonction hypergéométrique qui peut être résolue numériquement pour trouver les niveaux d'énergie discrets E_{n_r} des états liés.

3.4 Potentiels déformés de Hulthén

3.4.1 Premier cas : $0 < q < 1$, $r \in \mathbb{R}^+$.

Pour $0 < q < 1$, les potentiels (3.1) sont des formes générales continues sur l'intervalle \mathbb{R}^+ du potentiel de Hulthén. La discussion de ce cas diffère légèrement de l'analyse effectuée ci dessus. En introduisant comme suit une nouvelle variable y

$$y = 1 - qe^{-\alpha r}, \quad (3.16)$$

et en posant

$$u_0(r) = y^P (1 - y)^Q \varphi(y), \quad (3.17)$$

on obtient pour $\varphi(y)$ l'équation hypergéométrique suivante :

$$\left[y(1 - y) \frac{d^2}{dy^2} + [2P - (2P + 2Q + 1)y] \frac{d}{dy} - (P + Q + \mu)(P + Q - \mu) \right] \varphi(y) = 0. \quad (3.18)$$

En procédant comme dans le cas précédent, la solution de l'équation différentielle (3.18), pour laquelle $u_0(r)$ satisfait les conditions (3.7) et (3.8), peut s'écrire

$$\varphi(y) = N {}_2F_1(P + Q + \mu, P + Q - \mu, 2P; 1 - qe^{-\alpha r}), \quad (3.19)$$

où P , Q et μ sont les mêmes coefficients donnés par les équations (3.10) et (3.12). N désigne un facteur constant. La fonction d'onde satisfaisant les équations (3.4), pour $l = 0$, (3.7) et (3.8) est donc donnée par (3.17) et (3.19) ainsi :

$$u_0(r) = N (1 - qe^{-\alpha r})^P (qe^{-\alpha r})^Q {}_2F_1(P + Q + \mu, P + Q - \mu, 2P; 1 - qe^{-\alpha r}). \quad (3.20)$$

Alors, les niveaux d'énergie peuvent être trouvés à partir d'une solution numérique de l'équation transcendante

$${}_2F_1(P + Q + \mu, P + Q - \mu, 2P; 1 - q) = 0. \quad (3.21)$$

3.4.2 Deuxième cas : $q \geq 1$ et $r_0 < r < +\infty$.

Dans ce cas, nous nous limitons à la discussion de la solution de l'équation différentielle radiale (3.4), pour $l = 0$, dans l'intervalle $]r_0, +\infty[$ car, dans l'intervalle $]0, r_0[$, la solution de cette équation n'est pas possible analytiquement.

La solution (3.20) est toujours valable, mais elle doit satisfaire les conditions aux limites

$$\lim_{r \rightarrow r_0} u_0(r) = 0, \quad (3.22)$$

et

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_0(r) = 0. \quad (3.23)$$

En utilisant la formule de transformation de Gauss (2.18) (voir chapitre précédent), nous pouvons réécrire (3.20) ainsi

$$\begin{aligned}
u_0(r) &= N \frac{\Gamma(2P)\Gamma(-2Q)}{\Gamma(P-Q-\mu)\Gamma(P-Q+\mu)} (1-qe^{-\alpha r})^P (qe^{-\alpha r})^Q \\
&\quad \times {}_2F_1(P+Q+\mu, P+Q-\mu, 2Q+1; qe^{-\alpha r}) \\
&\quad + N \frac{\Gamma(2P)\Gamma(2Q)}{\Gamma(P+Q+\mu)\Gamma(P+Q-\mu)} (1-qe^{-\alpha r})^P (qe^{-\alpha r})^{-Q} \\
&\quad \times {}_2F_1(P-Q-\mu, P-Q+\mu, 1-2Q; qe^{-\alpha r}).
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Il est clair que la première condition à la limite (3.22) est satisfaite. La seconde condition à la limite (3.23) exige que le coefficient de $(qe^{-\alpha r})^{-Q}$ soit nul. Puisque la fonction $\Gamma(z)$ a des pôles simples à $z = 0, -1, -2, -3, \dots$, le second terme de l'expression (3.24) s'annulera identiquement si

$$P+Q-\mu = -n_r; \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, \tag{3.25}$$

où n_r est le nombre de noeuds de la fonction d'onde radiale, conformément aux définitions (3.9), (3.10) et (3.12), on obtient par conséquent, pour les niveaux d'énergie les valeurs

$$E_{n_r}^2 - M^2 = - \left[\frac{(A + q\alpha n_r)^2 - \gamma - q\beta}{2q(A + q\alpha n_r)} \right]^2, \tag{3.26}$$

et les fonctions d'onde radiales sont données par

$$\begin{aligned}
u_0(r) &= C (e^{\alpha r} - q)^P (e^{-\alpha r})^{-\alpha(P+Q_{n_r})r} \\
&\quad \times {}_2F_1(2P+2Q_{n_r}-b, b, 2Q_{n_r}+1; qe^{-\alpha r}),
\end{aligned} \tag{3.27}$$

où

$$b = P + Q_{n_r} - \sqrt{P^2 + Q_{n_r}^2 - P + \frac{\beta}{q\alpha^2}}, \tag{3.28}$$

et C un facteur normalisant qui se calcule par la condition de normalisation

$$\int_{r_0}^{\infty} |u_0(r)|^2 dr = 1. \quad (3.29)$$

Nous avons indiqué, dans les chapitres précédents, un procédé simple de détermination de la constante de normalisation de la fonction d'onde. Suivant ce procédé, on trouve

$$C = \left[\frac{2\alpha Q_{n_r} (n_r + P + Q_{n_r}) \Gamma(n_r + 2P + 2Q_{n_r}) \Gamma(n_r + 2Q_{n_r} + 1)}{(n_r + P) n_r! \Gamma(n_r + 2P)} \right]^{\frac{1}{2}} \times \frac{1}{\Gamma(2Q_{n_r} + 1)}, \quad (3.30)$$

avec $Q_{n_r} = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M^2 - E_{n_r}^2}$.

3.5 Cas particuliers

3.5.1 Premier cas : Potentiel de Woods-Sawon

En faisant $q = -e^{\alpha R}$ et $\alpha R \gg 1$, il est possible d'obtenir de (3.1) les potentiels de Woods-Saxon

$$V_{WS}(r) = -\frac{\widetilde{V}_0}{e^{\alpha(r-R)} + 1}, \quad S_{WS}(r) = -\frac{\widetilde{S}_0}{e^{\alpha(r-R)} + 1}, \quad (3.31)$$

où $\widetilde{V}_0 = V_0 e^{-\alpha R}$ et $\widetilde{S}_0 = S_0 e^{-\alpha R}$ sont les profondeurs respectives des potentiels vecteur et scalaire. Le paramètre R est le rayon du potentiel et α^{-1} son épaisseur de surface.

Dans ce cas, la condition de quantification de l'énergie pour les états s peut être déterminée à l'aide de la formule de transformation de Gauss (2.18) (voir chapitre précédent) et en notant que $\frac{q}{q-1} \simeq 1$ pour $\alpha R \gg 1$. Ainsi donc l'équation (3.15) peut s'écrire

$$\frac{\Gamma(2\mu) \Gamma(1 + Q - P - \mu) \Gamma(Q + P - \mu)}{\Gamma(-2\mu) \Gamma(1 + Q - P + \mu) \Gamma(\nu + P + \mu)} (e^{-\alpha R})^{-2\mu} = -1. \quad (3.32)$$

Afin de simplifier la discussion de cette équation (3.32), nous considérons uniquement le cas où $\mu^2 < 0$. Ce qui signifie que le nombre μ est imaginaire pur.

En posant

$$\mu = i\nu \quad (3.33)$$

et en définissant ϕ_1 , ϕ_2 et ψ ainsi

$$\begin{cases} \phi_1 = \arg \Gamma(Q + P + i\nu), \\ \phi_2 = \arg \Gamma(Q - P + i\nu), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\nu), \end{cases} \quad (3.34)$$

nous pouvons réécrire (3.32) sous la forme :

$$\exp \left[2i\psi - 2i\phi_1 - 2i\phi_2 - 2i \arctan \left(\frac{\nu}{Q - P} \right) \right] (e^{-\alpha R})^{-2i\nu} = -1. \quad (3.35)$$

Ce qui conduit à la condition de quantification

$$\nu\alpha R + \psi - \phi_1 - \phi_2 - \arctan \left(\frac{\nu}{Q - P} \right) = (2n + 1) \frac{\pi}{2}, \quad (3.36)$$

avec $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

3.5.2 Deuxième cas : Potentiels de Hulthén standard

En posant $q = 1$ dans la définition (3.1), nous obtenons les potentiels de Hulthén standard

$$V_H(r) = -\frac{V_0}{e^{\alpha r} - 1}, \quad S_H(r) = -\frac{S_0}{e^{\alpha r} - 1}. \quad (3.37)$$

Le paramètre P défini par l'expression (3.12) peut s'écrire dans ce cas

$$P = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\gamma}{\alpha^2}} \right). \quad (3.38)$$

Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés peuvent se déduire des équations (3.26) et (3.27). On trouve :

$$E_{n_r}^{q=1} = \frac{V_0}{2} \frac{N - \frac{2MS_0}{\alpha^2}}{N + \frac{S_0^2}{\alpha^2}} \pm \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N + \frac{\gamma^2}{\alpha^2}}}{N + \frac{S_0^2}{\alpha^2}} \sqrt{N(M + S_0)4M - \alpha^2 N}, \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned}
u_0^{q=1}(r) &= \left[\frac{2\alpha Q_{n_r}(n_r + P + Q_{n_r})\Gamma(n_r + 2P + 2Q_{n_r})\Gamma(n_r + 2Q_{n_r} + 1)}{(n_r + P)n_r!\Gamma(n_r + 2P)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \frac{1}{\Gamma(2Q_{n_r} + 1)}(e^{\alpha r} - 1)^P e^{-\alpha(P+Q_{n_r})r} \\
&\times {}_2F_1(2P + 2Q_{n_r} - b, b, 2Q_{n_r} + 1; e^{-\alpha r}).
\end{aligned} \tag{3.40}$$

Ces résultats coïncident avec ceux obtenus par l'approche des intégrales de chemin [36].

3.5.3 Troisième cas : Potentiels exponentiels

En faisant $q = 0$ dans les expressions (3.1), nous obtenons les potentiels vecteur et scalaire du type exponentiel donnés par :

$$V(r) = -V_0 e^{-\alpha r}; \quad S(r) = -S_0 e^{-\alpha r}, \tag{3.41}$$

avec les paramètres V_0 , S_0 , et α définis par :

$$V_0 = \widetilde{V}_0 e^{\alpha r_0}; \quad S_0 = \widetilde{S}_0 e^{\alpha r_0}, \quad \alpha = \frac{\eta}{r_0}, \tag{3.42}$$

où \widetilde{V}_0 et \widetilde{S}_0 sont les profondeurs respectives des potentiels vecteur et scalaire, r_0 est la distance d'équilibre des deux noyaux d'une molécule diatomique. Dans ce cas, on peut voir des équations (3.9) et (3.12) que

$$\left\{ \begin{array}{l}
\mu \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} -\frac{1}{2} \frac{\beta}{\alpha \sqrt{\gamma}} + \frac{\sqrt{\gamma}}{q\alpha}, \quad P = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{\gamma}}{q\alpha}, \\
Q + \mu + P \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + Q - \frac{1}{2} \frac{\beta}{\alpha \sqrt{\gamma}} + \frac{2\sqrt{\gamma}}{q\alpha} \xrightarrow{q \rightarrow 0} \infty, \\
1 + Q + \mu - P \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + Q - \frac{1}{2} \frac{\beta}{\alpha \sqrt{\gamma}}.
\end{array} \right. \tag{3.43}$$

D'autre part, en utilisant la formule [27]

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta}\right) = {}_2F_1(\alpha, \gamma; z), \tag{3.44}$$

il est facile de montrer que, dans le cas limite $q \rightarrow 0$, la fonction d'onde (3.14) devient

$$u_0^{q=0}(r) = N (e^{-\alpha r})^Q \exp\left(-\frac{\sqrt{\gamma}}{\alpha} e^{-\alpha r}\right)^\mu {}_1F_1\left(\frac{1}{2} + Q - \frac{1}{2} \frac{\beta}{\alpha\sqrt{\gamma}}, 2Q + 1; \frac{2\sqrt{\gamma}}{\alpha} e^{-\alpha r}\right). \quad (3.45)$$

Pour que la fonction d'onde (3.45) tende vers zéro lorsque $r \rightarrow \infty$, la fonction hypergéométrique confluente contenue dans l'expression (3.45) doit se réduire à un polynôme. Cette condition signifie que

$$\frac{1}{2} + Q - \frac{1}{2} \frac{\beta}{\alpha\sqrt{\gamma}} = -n_r, \quad (3.46)$$

où $n_r = 0, 1, 2, \dots$. Les niveaux d'énergie sont alors donnés par

$$E_{n_r}^{q=0} = \frac{\alpha V_0}{S_0^2} \sqrt{\gamma} \left[\lambda_{n_r} \pm \sqrt{\lambda_{n_r}^2 - \frac{V_0^2}{S_0^2} \left(\lambda_{n_r} + \frac{M}{\alpha} \right) \left(\lambda_{n_r} - \frac{M}{\alpha} \right)} \right]; \quad (3.47)$$

où

$$\lambda_{n_r} = n_r - \frac{MS_0}{\alpha\sqrt{\gamma}} + \frac{1}{2}. \quad (3.48)$$

Ces résultats sont en accord avec ceux obtenus récemment à travers la résolution de l'équation de Klein-Gordon [41] et par application de la méthode d'itération asymptotique [42]. Il faut remarquer que la fonction d'onde (3.45) et le spectre d'énergie (3.47) peuvent évidemment être obtenus d'une autre manière. En utilisant la formule de transformation de Gauss (2.18), nous pouvons aussi exprimer (3.20) sous la forme :

$$u_0^{0 < q < 1}(r) = C(1 - qe^{-\alpha r})^P e^{-\alpha Q r} {}_2F_1(P + Q + \mu, P + Q - \mu, 2Q + 1; qe^{-\alpha r}), \quad (3.49)$$

où C est un facteur constant.

En prenant maintenant la limite $q \rightarrow 0$, et on se servant de la formule (3.44), on trouve la fonction d'onde (3.45) et donc l'expression (3.47) du spectre d'énergie.

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré que l'équation de Klein-Gordon radiale concernant les ondes s se résout exactement en considérant quatre cas distincts suivant les valeurs possibles du paramètre réel de déformation q . Dans le cas où le paramètre $q \geq 1$ et dans l'intervalle $]\frac{1}{\alpha} \ln q, +\infty[$ de variation de la variable radiale, le spectre d'énergie est une expression analytique qui coïncide avec le résultat obtenu au moyen de l'approche de la supersymétrie. Les fonctions d'onde correspondantes sont correctement normalisées. Pour $q < 0$ et $0 < q < 1$, les niveaux d'énergie des états liés sont définis par une équation transcendante comprenant une fonction hypergéométrique. Ceci montre clairement que la méthode de la supersymétrie en mécanique quantique ne peut pas être appliquée dans ces deux cas. Enfin, lorsque $q = 0$, on a un potentiel vecteur et un potentiel scalaire du type exponentiel. La solution de l'équation de Klein-Gordon est déduite comme un cas limite à partir de celles relatives à $q < 0$ et $0 < q < 1$.

Chapitre 4

Solution de l'équation de Klein-Gordon pour les états l d'une particule chargée dans des potentiels vecteur et scalaire de Hulthén généralisés

4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons étudié le problème d'une particule chargée et sans spin en présence du potentiel vecteur $V_q(r)$ et d'un potentiel scalaire $S_q(r)$ en nous limitant à la résolution exacte de l'équation de Klein-Gordon correspondant aux ondes s ($l = 0$). Dans ce chapitre, nous allons étendre la résolution de cette équation par un calcul analytique simple dans le cas général caractérisé par la présence d'un potentiel centrifuge homogène à une énergie cinétique de rotation dépendant du nombre quantique azimutal l . En réalité, l'équation de Klein-Gordon dans ce cas est trop compliquée et ne se laisse pas traiter exactement. Il faut alors avoir recours à une résolution basée sur une méthode d'approximation qui permet d'obtenir analytiquement une solution approchée de l'équation.

Deux tentatives, concernant la résolution de cette équation, apparaissent dans deux articles publiés récemment. Le premier concerne l'équation de Klein-Gordon radiale ordinaire [43] et le second présente une étude dans un espace de dimension arbitraire [44]. Cependant, nous devons signaler que les résultats de ces deux études sont partiellement corrects. Par conséquent, un traitement rigoureux de ce problème s'impose et une clarification de la validité de l'approximation utilisée est nécessaire.

4.2 Résolution de l'équation de Klein-Gordon

Reprenons l'équation différentielle radiale

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(E + \frac{V_0}{e^{\alpha r} - q} \right)^2 - \left(M - \frac{S_0}{e^{\alpha r} - q} \right)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0. \quad (4.1)$$

Toute solution de cette équation acceptable physiquement doit satisfaire les conditions aux limites

$$u_l(r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} 0 \quad (4.2)$$

et

$$u_l(r_0) = 0 \text{ si } q \geq 1, \quad (4.3)$$

ou

$$u_0(0) = 0 \quad \text{si } 0 < q < 1, \quad (4.4)$$

avec $r_0 = \frac{1}{\alpha} \ln q$.

Nous savons bien que l'équation (4.1) n'admet pas de solutions analytiques pour $l \neq 0$ à cause du potentiel centrifuge. Mais, à défaut de la résolution rigoureuse de cette équation, nous pouvons utiliser l'une des méthodes d'approximation qui permettent d'obtenir analytiquement des solutions approchées de l'équation (4.1). Nous pouvons par exemple remplacer le potentiel centrifuge par une expression semblable aux termes du potentiel contenu dans l'équation. Il est

commode de prendre

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{\alpha^2 q e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} \quad (4.5)$$

mais il faudrait préciser la condition de validité de cette approximation.

4.2.1 Validité de l'approximation

Examinons maintenant la condition de validité de cette approximation.

Pour $q > 0$, on réécrit le second membre de (4.5) sous la forme :

$$\frac{\alpha^2 q e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} = \frac{\alpha^2}{4 \sinh^2 \left[\frac{\alpha}{2} \left(r - \frac{1}{\alpha} \ln q \right) \right]} \quad (4.6)$$

et pour $\alpha r - \ln q \ll 1$, on a

$$\frac{\alpha^2 q e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} \simeq \frac{1}{\left(r - \frac{1}{\alpha} \ln q \right)^2} - \frac{\alpha^2}{12} \xrightarrow{r \rightarrow \frac{1}{\alpha} \ln q} \infty \quad \text{lorsque } q \geq 1. \quad (4.7)$$

Dans le cas contraire où $q < 0$, on peut réécrire

$$\frac{\alpha^2 q e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} = \frac{\alpha^2}{4 \cosh^2 \left[\frac{\alpha}{2} \left(r + \frac{1}{\alpha} \ln(-q) \right) \right]}, \quad (4.8)$$

et si on suppose $\alpha r + \ln(-q) \ll 1$, on obtient

$$\frac{\alpha^2 q e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} \simeq \frac{\alpha^2}{4} \left[1 + \frac{1}{4} (\alpha r + \ln(-q))^2 \right]. \quad (4.9)$$

A partir des équations (4.7) et (4.9), on voit clairement que l'approximation (4.5) peut être appliquée uniquement dans le cas où $q \geq 1$.

4.2.2 Spectre d'énergie et fonctions d'onde des états liés

En adoptant l'approximation (4.5) valable pour $q \geq 1$, dans l'intervalle $r_0 < r < \infty$, l'équation différentielle radiale (4.1) s'écrit

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(E + \frac{V_0}{e^{\alpha r} - q} \right)^2 - \left(M - \frac{S_0}{e^{\alpha r} - q} \right)^2 - \frac{l(l+1)\alpha^2 q e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} + \frac{\alpha^2 l(l+1)}{12} \right] u_l(r) = 0. \quad (4.10)$$

Il est commode de faire le changement de variable $y = qe^{-\alpha r}$ et d'introduire les notations suivantes :

$$\begin{cases} \epsilon = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M'^2 - E^2}, \quad M'^2 = M^2 + \frac{\alpha^2 l(l+1)}{12}, \\ \beta = \frac{1}{\alpha} \sqrt{2(MS_0 + EV_0)}, \quad \nu = \frac{1}{\alpha} \sqrt{S_0^2 - V_0^2}. \end{cases} \quad (4.11)$$

On obtient alors l'équation

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{d}{dy} - \frac{\epsilon^2}{y^2} + \frac{\beta^2}{qy(1-y)} - \frac{\nu^2}{q^2(1-y)^2} - \frac{l(l+1)}{y(1-y)^2} \right] u_l(r) = 0. \quad (4.12)$$

En introduisant une nouvelle fonction $\varphi(y)$ à travers la relation

$$u_l(r) = (1-y)^\delta y^\epsilon \varphi(y), \quad (4.13)$$

nous obtenons à partir de (4.12) l'équation différentielle hypergéométrique

$$\left[y(1-y) \frac{d^2}{dy^2} + [2\epsilon + 1 - (2\epsilon + 2\delta + 1)y] \frac{d}{dy} - \left(\delta^2 + 2\epsilon\delta - \frac{\beta^2}{q} - \frac{\nu^2}{q^2} \right) \right] \varphi(y) = 0, \quad (4.14)$$

en imposant

$$\delta = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{\nu^2}{q^2} + l(l+1)}. \quad (4.15)$$

L'équation (4.14) a une forme semblable à celle obtenue dans le cas du potentiel de Manning-Rosen traité au deuxième chapitre et la solution $u_l(r)$ qui satisfait la condition à la limite (4.2) est

$$u_l(r) = N (1-y)^\delta y^\epsilon {}_2F_1(-n_r, n_r + 2\epsilon + 2\delta, 2\epsilon + 1; y), \quad (4.16)$$

où

$$n_r = -\epsilon - \delta + \sqrt{\epsilon^2 + \frac{\beta^2}{q} + \frac{\nu^2}{q^2}}; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.17)$$

et N est une constante de normalisation.

Compte tenu des équations (4.11) et (4.17), les niveaux d'énergie seront donc donnés par :

$$E_{n_r, l}^{q \geq 1} = \frac{\pm q \alpha^2 B_{n_r, l} D_{n_r, l} - V_0 (2S_0 M - \alpha^2 A_{n_r, l})}{2(V_0^2 + q^2 \alpha^2 B_{n_r, l}^2)} \quad (4.18)$$

avec

$$\begin{cases} A_{n_r, l} = q [n_r^2 + (2n_r + 1)\delta + l(l + 1)], \\ B_{n_r, l} = n_r - \delta, \quad C_{n_r, l} = S_0 A_{n_r, l} + q^2 \left[M + \frac{\alpha^2 l(l+1)}{12M} \right] B_{n_r, l}^2 \\ D_{n_r, l} = \sqrt{4M(C_{n_r, l} - M\nu^2) - \alpha^2 A_{n_r, l}^2 + \frac{V_0^2}{3} l(l + 1)}. \end{cases} \quad (4.19)$$

Enfin, compte tenu du changement de variable $y = qe^{-\alpha r}$, nous obtenons les fonctions d'onde radiales sous la forme

$$\begin{aligned} u_l^{q \geq 1}(r) &= N_{n_r, l} (1 - qe^{-\alpha r})^\delta (qe^{-\alpha r})^{\epsilon_{n_r, l}} \\ &\quad \times {}_2F_1(-n_r, n_r + 2\epsilon_{n_r, l} + 2\delta, 2\epsilon_{n_r, l} + 1; qe^{-\alpha r}), \end{aligned} \quad (4.20)$$

avec

$$\epsilon_{n_r, l} = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M^2 - E_{n_r, l}^2}. \quad (4.21)$$

La constante de normalisation $N_{n_r, l}$ s'obtient à partir de la condition de normalisation

$$\int_{r_0}^{\infty} \left| u_l^{q \geq 1}(r) \right|^2 dr = 1. \quad (4.22)$$

En utilisant les formules bien connues (1.24), (1.25), (1.26) et (1.27) (voir le premier chapitre), on trouve

$$N_{n_r, l} = \left[\frac{2\alpha\epsilon_{n_r, l}(n_r + \epsilon_{n_r, l} + \delta) \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r, l} + 1) \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r, l} + 2\delta)}{n_r + \delta} \frac{1}{n_r! \Gamma(n_r + 2\delta)} \right]^{\frac{1}{2}} \times \frac{1}{\Gamma(2\epsilon_{n_r, l} + 1)}. \quad (4.23)$$

4.3 Cas particulier : Potentiels de Hulthén standard

En posant $q = 1$ dans l'équation (4.1), nous obtenons l'équation différentielle radiale associée aux potentiels de Hulthén standard.

Le paramètre δ défini par l'expression (4.15) peut s'écrire

$$\delta = \frac{1}{2} \sqrt{\nu^2 + (l + \frac{1}{2})^2}. \quad (4.24)$$

Le spectre discret de l'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés peuvent être déduits à partir des équations (4.18) et (4.20),

$$E_{n_r, l}^{q \geq 1} = \frac{\pm \alpha^2 B_{n_r, l} D_{n_r, l} - V_0(2S_0 M - \alpha^2 A_{n_r, l})}{2(V_0^2 + \alpha^2 B_{n_r, l}^2)} \quad (4.25)$$

$$u_l^{q \geq 1}(r) = \left[\frac{2\alpha\epsilon_{n_r, l}(n_r + \epsilon_{n_r, l} + \delta) \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r, l} + 1) \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r, l} + 2\delta)}{n_r + \delta} \frac{1}{n_r! \Gamma(n_r + 2\delta)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma(2\epsilon_{n_r, l} + 1)} (1 - e^{-\alpha r})^\delta (e^{-\alpha r})^{\epsilon_{n_r, l}} \times {}_2F_1(-n_r, n_r + 2\epsilon_{n_r, l} + 2\delta, 2\epsilon_{n_r, l} + 1; qe^{-\alpha r}), \quad (4.26)$$

avec

$$\begin{cases} A_{n_r, l} = n_r^2 + (2n_r + 1)\delta + l(l + 1), \\ B_{n_r, l} = n_r - \delta, \quad C_{n_r, l} = S_0 A_{n_r, l} + \left[M + \frac{\alpha^2 l(l+1)}{12M} \right] B_{n_r, l}^2 \\ D_{n_r, l} = \sqrt{4M(C_{n_r, l} - M\nu^2) - \alpha^2 A_{n_r, l}^2 + \frac{V_0^2}{3} l(l + 1)}. \end{cases} \quad (4.27)$$

Deuxième partie

Commentaires

COMMENT

Comment on ‘shape invariance and the supersymmetry WKB approximation for a diatomic molecule potential’

F Benamira, L Guechi and A Zouache

Laboratoire de Physique Théorique, Département de Physique, Faculté des Sciences Exactes, Université Mentouri-Constantine, Route d’Ain El Bey, Constantine, Algeria

Received 31 January 2007

Published 17 April 2007

Online at stacks.iop.org/JPhysA/40/4915

Abstract

We comment on several incorrect results given in a recent paper by Jia and co-workers. In particular, it is pointed out that their discussion with the help of the shape invariance approach and the supersymmetry WKB approximation is wrong, since the superpotential $W(r) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}\left(\frac{P}{e^{\eta r} - \lambda} + Q\right)$ of the four-parameter diatomic molecule potential employed in their calculation is not suitable in the case where the deformation parameter λ is $\lambda < 0$ or $0 < \lambda < 1$. The correct results for the energy levels and wavefunctions can be obtained in standard quantum mechanics through resolution of Schrödinger’s equation by taking into account the different ranges of the shape parameter λ of the potential.

PACS number: 03.65.Ge

In a recent paper, Jia and co-workers [1] have discussed by means of the shape-invariance approach and the supersymmetry WKB approximation the problem of a diatomic molecule subjected to a four-parameter potential $V(r)$ defined by

$$v(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) = \frac{a}{(e^{\eta r} - \lambda)^2} - \frac{b}{e^{\eta r} - \lambda}, \quad (1)$$

with a , b and η as the real positive constants given by $a = \frac{2m}{\hbar^2} D_e (e^\alpha - \lambda)^2$, $b = \frac{4m}{\hbar^2} D_e (e^\alpha - \lambda)$ and $\eta = \frac{\alpha}{r_e}$. D_e , r_e and λ are the depth of the potential well, the equilibrium distance of the two nuclei and the dimensionless deformation parameter, respectively, and α is a positive dimensionless parameter, m being the reduced mass of the molecule.

In this comment, we would like to point out numerous errors in the paper of Jia and co-workers cited above. On the one hand, by expecting the first equation in (10) of [1], we have two solutions for the parameter P without any condition on the sign of the deformation parameter λ . Therefore, the conditions on the sign of λ in their solutions are not necessary.

The radial wavefunction (11) in [1] defined by

$$R(r) = \frac{N}{r} (e^{\eta r} - \lambda)^{P/\eta\lambda} e^{(Q-P/\lambda)r} \quad (2)$$

is a physically acceptable solution for the ground state problem only if the boundary condition,

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r R(r) = 0, \quad (3)$$

is satisfied. We see that solution (2) fulfils condition (3) when $Q < 0$. Then, if $P < 0$ and $Q < 0$, the second equation in (10) of [1] cannot be verified. In others words, the nonlinear Riccati equation (3) in [1] is not satisfied. In this case, one cannot cast the potential (1) into a supersymmetric form. Consequently, the solution

$$P = \frac{\eta\lambda - \sqrt{\eta^2\lambda^2 + 4a}}{2} \quad (4)$$

in (12) of [1] must be discarded.

On the other hand, in order to check the hermiticity of the radial momentum operator $P_r = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{r \partial r} r$, let us suppose that r lies in the range (r_0, ∞) with $r_0 \geq 0$. Then

$$\begin{aligned} 0 &= \langle R, P_r R \rangle - \langle R, P_r R \rangle^* \\ &= 4\pi \int_{r_0}^{\infty} [R^*(r)(P_r R(r)) - (P_r R(r))^* R(r)] r^2 dr \\ &= 4\pi \frac{\hbar}{i} \int_{r_0}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial r} |r R(r)|^2 \right] dr. \end{aligned} \quad (5)$$

Since $Q < 0$, $r R(r)$ vanishes as $r \rightarrow \infty$, the integral with respect to r is equal to its value at the point $r = r_0$. The operator P_r is not therefore Hermitian that if one restricts oneself to the wavefunction $R(r)$ which fulfils the condition

$$\lim_{r \rightarrow r_0} r R(r) = 0. \quad (6)$$

From this condition, it follows that

$$r_0 = \frac{1}{\eta} \ln \lambda \geq 0, \quad (7)$$

and consequently

$$\lambda \geq 1. \quad (8)$$

On the basis of the above remarks, it is clear that one can cast the potential (1) into a supersymmetric form only for $P > 0$, $Q < 0$ and $\lambda \geq 1$ contrary to the statement of the authors of [1].

As the shape-invariance approach and the supersymmetry WKB approximation are not convenient for handling the potential (1) whatever the signs of the parameters P and λ may be, we propose to deal with this diatomic molecule potential through the Schrödinger equation approach by considering all potential shapes determined by the parameter λ . If $\lambda = 0$, we have the ordinary Morse potential. In the case where $\lambda < 0$, the potential (1) may be called 'generalized Woods–Saxon potential' and 'generalized Hulthén potential' if $\lambda > 0$. Therefore, the potential function (1) represents three kinds of potentials according to the choice of λ . As the features of these potentials are quite different, it is clear that their treatment does not enable us to obtain their solutions in a unified manner. In what follows, we will be concerned in solving the Schrödinger equation

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} E - v(r) \right] R(r) = 0, \quad (9)$$

when the deformation parameter λ is positive or negative, separately.

First, for $\lambda < 0$, and $r \in \mathbb{R}^+$, the diatomic molecule potential (1) is a generalization of the Woods–Saxon potential. Substituting λ for $(-\lambda)$ in (1), that is to say the new parameter λ becomes positive, and introducing the new variable

$$y = \frac{\lambda}{e^{\eta r} + \lambda}, \tag{10}$$

the radial differential equation for $u(r) = rR(r)$ may be written as

$$\left[y(1-y) \frac{d^2}{dy^2} + (1-2y) \frac{d}{dy} + \frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2} \frac{1}{y(1-y)} - \frac{a}{\lambda^2 \eta^2} \frac{y}{1-y} + \frac{b}{\lambda \eta^2} \frac{1}{1-y} \right] u(r) = 0. \tag{11}$$

To solve this differential equation, we introduce a new function $\varphi(y)$ through the relation

$$u(r) = y^{\nu}(1-y)^{\mu} \varphi(y). \tag{12}$$

If we impose on ν and μ the conditions

$$\nu = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}}, \tag{13}$$

and

$$\mu = \sqrt{\frac{a}{\lambda^2 \eta^2} - \frac{b}{\lambda \eta^2} - \frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}}, \tag{14}$$

the following hypergeometric equation for $\varphi(y)$ is obtained:

$$\left[y(1-y) \frac{d^2}{dy^2} + [2\nu + 1 - (\alpha + \beta + 1)y] \frac{d}{dy} - \alpha\beta \right] \varphi(y) = 0, \tag{15}$$

where

$$\alpha = \nu + \mu + \frac{P}{\lambda \eta}, \quad \beta = \nu + \mu - \frac{P}{\lambda \eta} + 1, \tag{16}$$

and

$$\frac{P}{\lambda \eta} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{\lambda^2 \eta^2}} \right). \tag{17}$$

The general solution of the differential equation (15) is then given by

$$\begin{aligned} \varphi(y) = & A_{12} F_1 \left(\nu + \mu + \frac{P}{\lambda \eta}, \nu + \mu - \frac{P}{\lambda \eta} + 1, 2\nu + 1; y \right) \\ & + A_2 y^{-2\nu} {}_2F_1 \left(\mu - \nu + \frac{P}{\lambda \eta}, \mu - \nu - \frac{P}{\lambda \eta} + 1, 1 - 2\nu; y \right). \end{aligned} \tag{18}$$

So

$$\begin{aligned} u(r) = & A_1 y^{\nu} (1-y)^{\mu} {}_2F_1 \left(\nu + \mu + \frac{P}{\lambda \eta}, \nu + \mu - \frac{P}{\lambda \eta} + 1, 2\nu + 1; y \right) \\ & + A_2 y^{-\nu} (1-y)^{\mu} {}_2F_1 \left(\mu - \nu + \frac{P}{\lambda \eta}, \mu - \nu - \frac{P}{\lambda \eta} + 1, 1 - 2\nu; y \right). \end{aligned} \tag{19}$$

Now, for $u(r)$ to be a physically acceptable solution of equation (11), it has to satisfy the boundary conditions

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0, \tag{20}$$

and

$$u(0) = 0. \tag{21}$$

Also as $r \rightarrow \infty$, $y \rightarrow 0$ and $y^{-\nu} \rightarrow \infty$, the boundary condition (20) requires that $A_2 = 0$. Thus, according to (10), the solution of the radial Schrödinger equation (11) can be written as

$$u(r) = A_1 \left(\frac{e^{\eta r}}{\lambda} \right)^\mu \left(\frac{\lambda}{e^{\eta r} + \lambda} \right)^{\mu+\nu} {}_2F_1 \left(\nu + \mu + \frac{P}{\lambda\eta}, 1 + \nu + \mu - \frac{P}{\lambda\eta}, 2\nu + 1; \frac{\lambda}{e^{\eta r} + \lambda} \right), \quad (22)$$

where A_1 is a constant factor. Using the fact that the hypergeometric function in equation (22) tends to unity when $r \rightarrow \infty$, we obtain

$$u(r) \sim A_1 \lambda \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2 \eta^2}} e^{-\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} r}. \quad (23)$$

Thus, we have obtained the correct asymptotic behaviour. In order to get the possible energies for the bound states, we use the boundary condition (21). We realize that the solution (22) fulfils condition (21) when

$${}_2F_1 \left(\nu + \mu + \frac{P}{\lambda\eta}, 1 + \nu + \mu - \frac{P}{\lambda\eta}, 2\nu + 1; \frac{\lambda}{1 + \lambda} \right) = 0. \quad (24)$$

It follows that the energy levels can be found from a numerical solution of the transcendental equation (24).

On making the substitution $\lambda = q e^{\eta R}$ with $q > 0$ in expression (1), we obtain the following potential which is a special form of the deformed Woods–Saxon potential:

$$v_{WS}(r) = \frac{W_0}{(e^{\eta(r-R)} + q)^2} - \frac{V_0}{e^{\eta(r-R)} + q}, \quad (25)$$

where $V_0 = b e^{-\eta R}$, $W_0 = a e^{-2\eta R}$ and $\eta R \gg 1$. The parameter R is the nuclear radius and η^{-1} is the thickness of the surface layer.

In this case, we note that $\frac{\lambda}{1+\lambda} \simeq 1$ for $\eta R \gg 1$. Then, thanks to Gauss's transformation formula [2]

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1; 1-z) + (1-z)^{c-a-b} \\ &\times \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-z), \end{aligned} \quad (26)$$

it is easy to show that the quantization condition for the bound states (24) takes the following form:

$$\frac{\Gamma(2\mu)\Gamma(1+\nu-\frac{P}{\lambda\eta}-\mu)\Gamma(\nu+\frac{P}{\lambda\eta}-\mu)}{\Gamma(-2\mu)\Gamma(1+\nu-\frac{P}{\lambda\eta}+\mu)\Gamma(\nu+\frac{P}{\lambda\eta}+\mu)} \left(\frac{e^{-\eta R}}{q} \right)^{-2\mu} = -1. \quad (27)$$

To simplify the discussion of this equation (27), we only consider the case where $\mu^2 < 0$, so that according to equation (14), μ turns out to be imaginary. Writing

$$\mu = i\beta, \quad (28)$$

and defining ϕ_1 , ϕ_2 and ψ as

$$\begin{cases} \phi_1 = \arg \Gamma \left(\nu + \frac{P}{\lambda\eta} + i\beta \right), \\ \phi_2 = \arg \Gamma \left(\nu - \frac{P}{\lambda\eta} + i\beta \right), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\beta), \end{cases} \quad (29)$$

we can also express (27) in the form

$$\exp \left[2i\psi - 2i\phi_1 - 2i\phi_2 - 2i \arctan \left(\frac{\beta}{\nu - \frac{P}{\eta\lambda}} \right) \right] \left(\frac{e^{-\eta R}}{q} \right)^{-2i\beta} = -1. \quad (30)$$

This leads on to the quantization condition

$$\beta(\eta R + \ln q) + \psi - \phi_1 - \phi_2 - \arctan\left(\frac{\beta}{v - \frac{P}{\eta\lambda}}\right) = (2n + 1)\frac{\pi}{2}, \tag{31}$$

with $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

If we make the replacements $a = 0$ and $q = 1$, the potential (25) turns to the standard Woods–Saxon potential [3]. The quantization condition can be deduced from equation (27),

$$\beta\eta R + \psi - 2\phi - \arctan\left(\frac{\beta}{v}\right) = (2n + 1)\frac{\pi}{2}, \tag{32}$$

where

$$\begin{cases} \beta = \frac{1}{\eta} \sqrt{V_0 + \frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \phi = \arg \Gamma(v + i\beta), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\beta), \end{cases} \tag{33}$$

and $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. This last result is in agreement with that of the literature [3].

Now, for $\lambda > 0$, we have to inspect the variation of the potential $v(r)$ according to the values of the parameter λ . We must distinguish two cases. If $0 < \lambda < 1$, $v(r)$ is continuous on the whole interval \mathbb{R}^+ . But, if $\lambda \geq 1$, $v(r)$ has a strong singularity at the point $r = r_0 = \frac{1}{\eta} \ln \lambda$, and in this case, we have two distinct regions, one is defined by the interval $]0, r_0[$ and the other by the interval $]r_0, \infty[$. This leads us to deal with the Schrödinger equation for this potential in each case.

Consider first the case in which $\lambda \geq 1$. In this case, we will discuss the potential (1) only in the interval $]r_0, \infty[$ since, in the other interval, the solution cannot be analytically found.

Changing the independent variable r in (9) to y given by

$$y = \lambda e^{-\eta r},$$

the radial differential equation for $u(r) = rR(r)$ becomes

$$\left[y^2 \frac{d^2}{dy^2} + y \frac{d}{dy} + \frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2} - \frac{a}{\eta^2 \lambda^2} \frac{y^2}{(1-y)^2} + \frac{b}{\eta^2 \lambda} \frac{y}{1-y} \right] u(r) = 0. \tag{34}$$

Introducing a new function $\varphi(y)$ defined by the relation

$$u(r) = y^\nu (1-y)^\mu \varphi(y), \tag{35}$$

and using the notation

$$\begin{cases} \nu = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}}, & \mu = \frac{P}{\eta\lambda} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{\eta^2 \lambda^2}} \right), \\ \varepsilon = \sqrt{\nu^2 + \frac{a}{\eta^2 \lambda^2} + \frac{b}{\eta^2 \lambda}}, & \alpha' = \nu + \frac{P}{\eta\lambda} + \varepsilon, & \beta' = \nu + \frac{P}{\eta\lambda} - \varepsilon, \end{cases} \tag{36}$$

we obtain from (34) the hypergeometric differential equation

$$\left[y(1-y) \frac{d^2}{dy^2} + [2\nu + 1 - (\alpha' + \beta' + 1)y] \frac{d}{dy} - \alpha' \beta' \right] \varphi(y) = 0. \tag{37}$$

The general solution of this equation can be written in the form

$$\begin{aligned} \varphi(y) = & B_1 {}_2F_1\left(\frac{P}{\lambda\eta} + \nu + \varepsilon, \frac{P}{\lambda\eta} + \nu - \varepsilon, 2\nu + 1; y\right) \\ & + B_2 y^{-2\nu} {}_2F_1\left(\frac{P}{\lambda\eta} - \nu + \varepsilon, \frac{P}{\lambda\eta} - \nu - \varepsilon, 1 - 2\nu; y\right). \end{aligned} \tag{38}$$

To find the physically acceptable solution of (34), we have to impose the boundary conditions

$$\lim_{r \rightarrow r_0} u(r) = 0, \quad (39)$$

and

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0. \quad (40)$$

Also as $r \rightarrow \infty$, $y \rightarrow 0$ and $y^{-\nu} \rightarrow \infty$, the boundary condition (40) requires that $B_2 = 0$. Thus both boundary conditions will be satisfied if we choose $B_2 = 0$ and $\frac{P}{\lambda\eta} + \nu + \varepsilon = -n_r$ ($n_r = 0, 1, 2, \dots$). The possible energies for the bound states are then given by

$$E_{n_r} = -\frac{\hbar^2}{2m} Q^2, \quad (41)$$

and by using (26) the corresponding normalized wavefunctions can be expressed in the form

$$u_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) = \left[-\frac{2Q(P + n_r\lambda\eta - \lambda Q)}{(P + n_r\lambda\eta)} \frac{\Gamma(n_r + \frac{2P}{\eta\lambda})\Gamma(n_r + \frac{2P}{\eta\lambda} - \frac{2Q}{\eta})}{n_r!\Gamma(n_r - \frac{2Q}{\eta} + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \times \frac{1}{\Gamma(\frac{2P}{\eta\lambda})} (1 - \lambda e^{-\eta r})^{\frac{P}{\eta\lambda}} (\lambda e^{-\eta r})^{-\frac{Q}{\eta}} {}_2F_1\left(-n_r, n_r + \frac{2P}{\eta\lambda} - \frac{2Q}{\eta}, \frac{2P}{\eta\lambda}; 1 - \lambda e^{-\eta r}\right), \quad (42)$$

with

$$Q = \frac{(P + n_r\lambda\eta)^2 - a - \lambda b}{2\lambda(P + n_r\lambda\eta)}. \quad (43)$$

We realize that (42) fulfils condition (40) when

$$Q < 0. \quad (44)$$

Therefore, it is seen from (43) and (44) that

$$n_r < \left\lfloor \frac{\sqrt{a + \lambda b} - P}{\eta\lambda} \right\rfloor. \quad (45)$$

Here $\{k\}$ denotes the largest integer inferior to k .

Consider now the case in which $0 < \lambda < 1$. The analysis presented above holds; but in this case, we prefer to introduce the new variable $y = 1 - \lambda e^{-\eta r}$. Similarly, by using the boundary conditions $u(0) = 0$ and $\lim_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0$, we show that the solution of the radial differential equation has the form

$$u(r) = C_1 (1 - \lambda e^{-\eta r})^{\frac{P}{\eta\lambda}} (\lambda e^{-\eta r})^\nu {}_2F_1\left(\frac{P}{\lambda\eta} + \nu + \varepsilon, \frac{P}{\lambda\eta} + \nu - \varepsilon; 2\frac{P}{\lambda\eta}; 1 - \lambda e^{-\eta r}\right), \quad (46)$$

where C_1 is a constant factor. Then, the energy spectrum can be found from a numerical solution of the transcendental equation

$${}_2F_1\left(\frac{P}{\lambda\eta} + \nu + \varepsilon, \frac{P}{\lambda\eta} + \nu - \varepsilon, 2\frac{P}{\lambda\eta}; 1 - \lambda\right) = 0. \quad (47)$$

In conclusion, the shape-invariance approach and the supersymmetry WKB approximation employed by Jia and co-workers are shown inappropriate since only one of their solutions remains valid when $\lambda \geq 1$ and in the interval $\left[\frac{1}{\eta} \ln \lambda, \infty\right]$. The previous analysis reveals that the diatomic molecule potential cannot be cast in the supersymmetric quantum mechanics formalism whatever the parameter λ may be.

References

- [1] Jia C-S, Wang J-Y, He S and Sun L-T 2000 *J. Phys.: Math. Gen. A* **33** 6993–8
- [2] Gradshtein I S and Ryzhik I M 1965 *Tables of Integrals, Series and Products* (New York: Academic)
- [3] Flügge S 1974 *Practical Quantum Mechanics* (Berlin: Springer)

Comment on ‘Exact solutions of the s -wave Schrödinger equation with Manning–Rosen potential’

F Benamira, L Guechi and A Zouache

Laboratoire de Physique Théorique, Département de Physique, Faculté des Sciences Exactes, Université Mentouri, Route d’Ain El Bey, Constantine, Algeria

E-mail: guechilarbi@yahoo.fr

Received 5 February 2008

Accepted for publication 28 October 2008

Published 12 June 2009

Online at stacks.iop.org/PhysScr/80/017001

Abstract

We comment on several incorrect results obtained by Dong and García-Ravelo (2007 *Phys. Scr.* 75 307) in the discussion of the bound-state solutions of the radial Schrödinger equation for the Manning–Rosen potential. We have identified the inconsistency in their reasoning on the allowed values of the parameter α and we have constructed the correct energy spectrum together with the normalized wavefunctions. Furthermore, we have shown that the wavefunction normalization constant can be obtained in closed form.

PACS number: 03.65.Ge

In a recent paper, Dong and García-Ravelo [1] (hereafter referred to as DG) have discussed, through resolution of Schrödinger’s equation, the bound state solutions of the s waves for the so-called Manning–Rosen potential [2] defined by

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu b^2} \left[\frac{\alpha(\alpha-1)}{(e^{r/b}-1)^2} - \frac{A}{e^{r/b}-1} \right], \quad (1)$$

where A , b and α are the constants. It has a minimum at $r_0 = b \ln[1 + 2\alpha(\alpha-1)/A]$ with value

$$V(r_0) = -\frac{\hbar^2 A^2}{8\mu b^2 \alpha(\alpha-1)} \quad \text{for } \alpha < 0 \text{ or } \alpha > 1 \text{ and } A > 0.$$

The parameter b characterizes the range of the potential. If $\alpha = 0$ or $\alpha = 1$, the potential (1) reduces to the Hulthén potential [3].

In this comment, we would like to point out that relations (14), (15), (21) and (22) of (DG) are incorrect for $\alpha = 0$ since for $n = 0$, the energy eigenvalue is not finite and the radial wavefunctions $R_{E,0}(r)$ do not fulfill the boundary condition $R_{E,0}(0) = 0$. To find the eigenvalues and the corresponding suitably normalized eigenfunctions for $\alpha < 0$ or $\alpha > 1$, let us begin by writing the radial Schrödinger equation as

given by (DG)

$$\frac{d^2}{dr^2} R_{E,0}(r) - \frac{1}{b^2} \left[\frac{\alpha(\alpha-1)}{(e^{r/b}-1)^2} - \frac{A}{e^{r/b}-1} \right] R_{E,0}(r) + 2ER_{E,0}(r) = 0. \quad (2)$$

(Here, we have used a system of units for which the reduced mass μ and the Planck constant \hbar satisfy $\mu = \hbar = 1$.) By defining

$$z = e^{-r/b}, \quad \lambda = \sqrt{-2b^2 E} \quad (3)$$

and looking for solutions in the form

$$R_{E,0}(r) = (1-z)^\beta z^\lambda F(z), \quad (4)$$

in which, on account of the boundary conditions

$$R_{E,0}(0) = 0 \quad (5)$$

and

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_{E,0}(r) = 0, \quad (6)$$

we have to take $\beta \geq 1$ and λ must be a positive real parameter for the presence of bound states. Then, by substituting (3) and (4) into (2) and by imposing on β the condition

$$\beta(\beta-1) = \alpha(\alpha-1), \quad \text{i.e. } \beta = \alpha \text{ or } \beta = 1-\alpha, \quad (7)$$

the following hypergeometric differential equation for $F(z)$ is obtained:

$$z(1-z) \frac{d^2}{dz^2} F(z) + [2\lambda + 1 - (2\lambda + 2\beta + 1)z] \times \frac{d}{dz} F(z) - [\beta(2\lambda + 1) - A]F(z) = 0. \quad (8)$$

Thus, the wavefunctions satisfying equations (2), (4) and (6) are given by

$$R_{E,0}(r) = N(1-z)^\beta z^\lambda {}_2F_1(\beta + \lambda - \gamma, \beta + \lambda + \gamma, 2\lambda + 1; z), \quad (9)$$

where $\gamma = \sqrt{A + \beta(\beta - 1) + \lambda^2}$ and N is the normalization constant. For the bound-state problem, the solutions (9) fulfill the boundary condition (5) when

$$\beta + \lambda - \gamma = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots, \quad (10)$$

where n_r is the number of the nodes of the radial wavefunctions. The energy spectrum is then given by

$$E_{n_r} = -\frac{1}{8b^2} \left[\frac{A + \beta(\beta - 1)}{n_r + \beta} - (n_r + \beta) \right]^2, \quad (11)$$

where $\beta = \alpha$ or $\beta = 1 - \alpha$ and $n_r = 0, 1, 2, \dots, n_{r\max} = \{\sqrt{A + \beta(\beta - 1)} - \beta\}$; $n_{r\max}$ being the largest integer which is less than $\sqrt{A + \beta(\beta - 1)} - \beta$.

Thus, according to the conditions on the parameter α , the possible energies for the bound states and the corresponding radial wavefunctions are written explicitly, for $\alpha > 1$:

$$\left\{ \begin{aligned} E_{n_r} &= -\frac{1}{8b^2} \left[\frac{A - \alpha}{n_r + \alpha} - \frac{n_r(n_r + 2\alpha)}{n_r + \alpha} \right]^2; \\ n_r &= 0, 1, 2, \dots, n_{r\max} = \{\sqrt{A + \alpha(\alpha - 1)} - \alpha\}, \\ R_{n_r,0}(r) &= N_{n_r} (1 - e^{-r/b})^\alpha e^{-(\lambda_{n_r}/b)r} \\ &{}_2F_1(-n_r, n_r + 2\lambda_{n_r} + 2\alpha, 2\lambda_{n_r} + 1; e^{-r/b}) \end{aligned} \right. \quad (12)$$

and for $\alpha < 0$:

$$\left\{ \begin{aligned} E_{n_r} &= -\frac{1}{8b^2} \left[\frac{A + \alpha - 1}{n_r - \alpha + 1} - \frac{n_r(n_r + 2(1 - \alpha))}{n_r - \alpha + 1} \right]^2; \\ n_r &= 0, 1, 2, \dots, n_{r\max} = \{\sqrt{A + \alpha(\alpha - 1)} + \alpha - 1\}, \\ R_{n_r,0}(r) &= N_{n_r} (1 - e^{-r/b})^{1-\alpha} e^{-(\lambda_{n_r}/b)r} \\ &{}_2F_1(-n_r, n_r + 2\lambda_{n_r} - 2\alpha + 2, 2\lambda_{n_r} + 1; e^{-r/b}), \end{aligned} \right. \quad (13)$$

where $\lambda_{n_r} = \sqrt{-2b^2 E_{n_r}}$.

On the other hand, note that the procedure to find the normalization constant N_{n_r} adopted by (DG) is not suitable since it yields N_{n_r} as a doublesum of products of many Γ -functions of s and t . Nevertheless, N_{n_r} can be easily evaluated in closed form. To do this, we start by using the relation linking the hypergeometric function and the Jacobi polynomials (see formula (8.962.1) in [4])

$${}_2F_1\left(-n, n + \nu + \mu + 1, \nu + 1; \frac{1-x}{2}\right) = \frac{n! \Gamma(\nu + 1)}{\Gamma(n + \nu + 1)} P_n^{(\nu, \mu)}(x) \quad (14)$$

to rewrite the radial wavefunctions in (12) or (13) as

$$R_{n_r,0}(r) = N_{n_r} \frac{n_r! \Gamma(2\lambda_{n_r} + 1)}{\Gamma(n_r + 2\lambda_{n_r} + 1)} (1 - e^{-r/b})^\beta e^{-(\lambda_{n_r}/b)r} P_{n_r}^{(2\lambda_{n_r}, 2\beta - 1)}(1 - 2e^{-r/b}). \quad (15)$$

From the normalization condition $\int_0^\infty [R_{n_r,0}(r)]^2 dr = 1$, and under the coordinate change $x = 1 - 2e^{-r/b}$, the normalization constant N_{n_r} in (15) is given by

$$N_{n_r}^{-2} = \frac{b}{2} \left[\frac{n_r! \Gamma(2\lambda_{n_r} + 1)}{\Gamma(n_r + 2\lambda_{n_r} + 1)} \right]^2 \int_{-1}^1 \left(\frac{1-x}{2} \right)^{2\lambda_{n_r} - 1} \times \left(\frac{1+x}{2} \right)^{2\beta} [P_{n_r}^{(2\lambda_{n_r}, 2\beta - 1)}(x)]^2 dx. \quad (16)$$

The calculation of this integral can be done by writing one of the 2β factors $(1+x)/2$ in the form

$$\frac{1+x}{2} = 1 - \frac{1-x}{2} \quad (17)$$

and by making use of the following two integrals (see formula (7.391.5) in [4]):

$$\int_{-1}^1 (1-x)^{\nu-1} (1+x)^\mu [P_n^{(\nu, \mu)}(x)]^2 dx = \frac{2^{\nu+\mu} \Gamma(n + \nu + 1) \Gamma(n + \mu + 1)}{n! \nu \Gamma(n + \nu + \mu + 1)}, \quad (18)$$

where $\text{Re}(\nu) > 0$ and $\text{Re}(\mu) > -1$, and (see formula (7.391.1) in [4])

$$\int_{-1}^1 (1-x)^\nu (1+x)^\mu [P_n^{(\nu, \mu)}(x)]^2 dx = \frac{2^{\nu+\mu+1} \Gamma(n + \nu + 1) \Gamma(n + \mu + 1)}{n! (2n + \nu + \mu + 1) \Gamma(n + \nu + \mu + 1)}, \quad (19)$$

which is valid for $\text{Re}(\nu) > -1$ and $\text{Re}(\mu) > -1$. This leads to

$$N_{n_r} = \left[\frac{2 \lambda_{n_r} (n_r + \lambda_{n_r} + \beta)}{b} \frac{\Gamma(n_r + 2\lambda_{n_r} + 1) \Gamma(n_r + 2\lambda_{n_r} + 2\beta)}{n_r! \Gamma(n_r + 2\beta)} \right]^{1/2} \times \frac{1}{\Gamma(2\lambda_{n_r} + 1)}. \quad (20)$$

In the case where $\alpha = 0$ or $\alpha = 1$, the Manning–Rosen potential (1) reduces to the Hulthén potential. By setting $\beta = 1$, the energy spectrum and the normalized wavefunctions are deduced from (11) and (15), respectively,

$$E_{n_r} = -\frac{1}{8b^2} \left[\frac{A}{n_r + 1} - (n_r + 1) \right]^2; \quad (21)$$

$$n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, n_{r\max} = \{\sqrt{A} - 1\},$$

$$R_{n_r,0}(r) = \left[\frac{2 \lambda_{n_r} (n_r + \lambda_{n_r} + 1) (n_r + 2\lambda_{n_r} + 1)}{b} \right]^{1/2} \times \frac{\Gamma(n_r + 2\lambda_{n_r} + 1)}{(n_r + 1)! \Gamma(2\lambda_{n_r} + 1)} (1 - e^{-r/b}) e^{-(\lambda_{n_r}/b)r} \times {}_2F_1(-n_r, n_r + 2\lambda_{n_r} + 2, 2\lambda_{n_r} + 1; e^{-r/b}). \quad (22)$$

Using Gauss's transformation formula (see formula (9.131.2) in [4])

$$\begin{aligned} & {}_2F_1(a, b, c; z) \\ &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1; 1-z) \\ &+ \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-z)^{c-a-b} \\ &\times {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-z), \end{aligned} \quad (23)$$

one can then easily see that if one substitutes $2\lambda_{n_r} = p_n$, $b = a$ and $n_r + 1 = n$, one recovers the results obtained by path integration [5].

To conclude, the results of (DG) are incorrect because they are obtained without taking into account the boundary

condition $R_{E,0}(0) = 0$ together with the conditions on the parameter α for which the potential has a minimum. In other words, these conditions on α are required for the existence of bound states. Finally, the wavefunctions expressed in terms of the Jacobi polynomials are seen to be essential for obtaining the wave function normalization constant in closed form.

References

- [1] Dong S H and García-Ravelo J 2007 *Phys. Scr.* **75** 307
- [2] Manning M F and Rosen N 1933 *Phys. Rev.* **44** 953
Rosen N and Morse P M 1932 *Phys. Rev.* **42** 210
- [3] Hulthén L 1942 *Ark. Mat. Astron. Fys. A* **28** 5
- [4] Gradshteyn I S and Ryzhik I M 1969 *Tables of Integrals, Series and Products* (New York: Academic)
- [5] Cai J M, Cai P Y and Inomata A 1986 *Phys. Rev. A* **34** 4621

Comment

Comment on: “Exact bound state solutions of the s-wave Klein–Gordon equation with the generalized Hulthén potential”
[Phys. Lett. A 331 (2004) 374]

F. Benamira, L. Guechi*, A. Zouache

Laboratoire de Physique Théorique, Département de Physique, Université Mentouri, Route d’Ain El Bey, Constantine, Algeria

Received 11 February 2007; accepted 30 May 2007

Available online 2 June 2007

Communicated by P.R. Holland

Abstract

The supersymmetric quantum mechanical method employed by Gang Chen and co-workers to solve the problem of the s states of a Klein–Gordon particle under the action of generalized vector plus scalar Hulthén-type potentials is shown inadequate since only one of their solutions remains valid for $q \geq 1$ and $\frac{1}{\alpha} \ln q < r < \infty$. When $q < 0$ or $0 < q < 1$, a transcendental equation is derived for the energy eigenvalues by applying appropriate boundary conditions on the eigenfunctions.

© 2007 Elsevier B.V. All rights reserved.

PACS: 03.65.Ge; 03.65.Pm

Keywords: Generalized Hulthén potential; Klein–Gordon equation; Bound states

In a recent Letter, Gang Chen and co-workers [1] (hereafter referred to as GC) have considered the problem of a spinless relativistic particle under the action of deformed vector plus scalar Hulthén-type potentials defined by

$$V(r) = -\frac{V_0}{e^{\alpha r} - q}, \quad S(r) = -\frac{S_0}{e^{\alpha r} - q}, \quad (1)$$

where V_0 , S_0 and α are positive constants and q is a deformation parameter which can take any real value different from zero. The authors GC have tried to exploit the supersymmetric quantum mechanical method to solve the s-wave Klein–Gordon equation given by [2,3]

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + [E - V(r)]^2 - [m + S(r)]^2 \right\} u(r) = 0, \quad (2)$$

where $u(r) = r\psi(r)$ and $\psi(r)$ is the radial wave function.

In this comment, we would like to point out that they have performed several incorrect manipulations so that their final results are not satisfactory for all real values of $q \neq 0$. In order to clarify our criticism, let us begin by expecting Eq. (11) in GC, referred to as (GC 11) henceforth, we have two solutions for the parameter A (see (GC 22) and (GC 23)) without any condition on the sign of the deformation parameter q . Therefore, the conditions on the sign of q in their solutions are not proved.

Next, the ground-state wave function $u_0(r)$ given by Eq. (GC 21) should be written as

$$u_0(r) = N(e^{\alpha r} - q)^{A/q\alpha} e^{-(B+A/q)r}. \quad (3)$$

For $u_0(r)$ to be a physically acceptable solution, it has to satisfy the appropriate boundary condition

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_0(r) = 0. \quad (4)$$

We see that the solution (3) fulfills the condition (4) when $B > 0$. Then, if $A < 0$ and $B > 0$, Eq. (GC 12) cannot be verified. In other words, this means that the nonlinear Riccati equation (GC 8) is not satisfied in this case. Consequently, the

DOI of original article: 10.1016/j.physleta.2004.09.032.

* Corresponding author.

E-mail address: guechilarbi@yahoo.fr (L. Guechi).

solution

$$A = \frac{q\alpha - \sqrt{q^2\alpha^2 + 4\gamma}}{2}, \tag{5}$$

given by (GC 23) must be discarded.

On the other hand, in order to check the hermiticity of the radial momentum operator $P_r = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{r\partial r} r$, let us suppose that r lies in the range (r_0, ∞) with $r_0 \geq 0$. Then,

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \psi_0, P_r \psi_0 \rangle - \langle \psi_0, P_r \psi_0 \rangle^* \\ &= 4\pi \int_{r_0}^{\infty} [\psi_0^*(r)(P_r \psi_0(r)) - (P_r \psi_0(r))^* \psi_0(r)] r^2 dr \\ &= 4\pi \frac{\hbar}{i} \int_{r_0}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial r} |r\psi_0(r)|^2 \right] dr \\ &= 4\pi \frac{\hbar}{i} \int_{r_0}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial r} |u_0(r)|^2 \right] dr. \end{aligned} \tag{6}$$

Since $B > 0$, $u_0(r)$ vanishes as $r \rightarrow \infty$, the integral with the respect to r is equal to its value at the point $r = r_0$. The operator P_r is not therefore Hermitian that if one restricts oneself to the wave function $u_0(r)$ which fulfills the condition

$$\lim_{r \rightarrow r_0} u_0(r) = 0. \tag{7}$$

From this condition, it follows that

$$r_0 = \frac{1}{\alpha} \ln q \geq 0, \tag{8}$$

and we have then that

$$q \geq 1. \tag{9}$$

On the basis of the above considerations, it is clear that the supersymmetric quantum mechanical approach applied to the potentials (1) is valid only if $A > 0$, $B > 0$ and $q \geq 1$ contrary to the statement of GC. Furthermore the radial wave functions given by Eq. (GC 27) which should be expressed as

$$\begin{aligned} u(r) &= N(e^{\alpha r} - q)^P e^{-\alpha(P+Q)r} \\ &\quad \times {}_2F_1(2(P+Q) - b, b, 2Q + 1; qe^{-\alpha r}), \end{aligned} \tag{10}$$

are valid for $Q > 0$, $P > 0$, $q \geq 1$ and $\frac{1}{\alpha} \ln q < r < \infty$. Here we have introduced the notation

$$\begin{cases} P = \frac{A}{q\alpha} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\gamma}{q^2\alpha^2}} \right), & Q = \frac{1}{\alpha} \sqrt{m^2 - E^2}, \\ \beta = 2(EV_0 + mS_0), & \gamma = S_0^2 - V_0^2, \\ b = P + Q - \sqrt{P^2 + Q^2 - P + \frac{\beta}{q\alpha^2}}. \end{cases} \tag{11}$$

The solution (10) fulfills the boundary condition

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0, \tag{12}$$

when

$$\begin{aligned} P + Q + \sqrt{P^2 + Q^2 - P + \frac{\beta}{q\alpha^2}} &= -n_r, \\ n_r &= 0, 1, 2, 3, \dots, \end{aligned} \tag{13}$$

where n_r is the number of the nodes of the radial wave functions. The energy spectrum is then given by

$$E_{n_r}^2 - m^2 = - \left[\frac{(A + q\alpha n_r)^2 - \gamma - q\beta}{2q(A + q\alpha n_r)} \right]^2. \tag{14}$$

Besides the above case, a complete discussion of this problem includes three other cases according to the values of the deformation parameter q . As an alternative approach to the formalism of supersymmetric quantum mechanics, the direct resolution of the Klein–Gordon equation (2) allows us to obtain the exact bound state solutions to the potentials (1) only in two cases:

(1) $q < 0$ for $r \in \mathbb{R}^+$.

To solve the Klein–Gordon equation (2), we introduce the new variable

$$y = \frac{q}{q - e^{\alpha r}}, \tag{15}$$

and we look for a solution in the form

$$u(r) = y^Q (1 - y)^\mu \varphi(y), \tag{16}$$

in which, on account of the boundary conditions

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0, \tag{17}$$

and

$$u(0) = 0, \tag{18}$$

Q and μ have to be positive. Substituting (15) and (16) into (2) and taking

$$\mu = \sqrt{Q^2 + \frac{\beta}{q\alpha^2} + \frac{\gamma}{q^2\alpha^2}}, \tag{19}$$

we obtain the following hypergeometric differential equation

$$\begin{aligned} \left[y(1 - y) \frac{d^2}{dy^2} + [2Q + 1 - (2Q + 2\mu + 2)y] \frac{d}{dy} \right. \\ \left. - (Q + \mu + P)(1 + Q + \mu - P) \right] \varphi(y) = 0, \end{aligned} \tag{20}$$

where P , Q , β and γ are similarly given by Eqs. (11). The solution of this equation, for which the boundary condition (17) is fulfilled, can be written

$$\begin{aligned} \varphi(y) &= N {}_2F_1 \left(Q + \mu + P, 1 + Q + \mu - P, 2Q + 1; \frac{q}{q - e^{\alpha r}} \right), \end{aligned} \tag{21}$$

where N is a constant factor. Thus, according to (15), the solution of the radial Klein–Gordon equation (2) is given by (16) and (21) as

$$\begin{aligned} u(r) &= N \left(\frac{q}{q - e^{\alpha r}} \right)^Q \left(\frac{e^{\alpha r}}{e^{\alpha r} - q} \right)^\mu \\ &\quad \times {}_2F_1 \left(Q + \mu + P, 1 + Q + \mu - P, 2Q + 1; \frac{q}{q - e^{\alpha r}} \right). \end{aligned} \tag{22}$$

In order to get the possible energies for the bound states, we use the boundary condition (18). We realize that the solution (22) fulfills the condition (18) when

$${}_2F_1\left(Q + \mu + P, 1 + Q + \mu - P, 2Q + 1; \frac{q}{q-1}\right) = 0. \quad (23)$$

Then, the energy values are given by the solution of this transcendental equation (23) which can be solved numerically.

$$(2) \quad 0 < q < 1 \text{ for } r \in \mathbb{R}^+.$$

The discussion will differ slightly from the above analysis by making the substitution $y = 1 - qe^{-\alpha r}$, and setting

$$u(r) = y^P (1 - y)^Q \varphi(y). \quad (24)$$

For $\varphi(y)$ the following hypergeometric equation is obtained

$$\left[y(1-y) \frac{d^2}{dy^2} + [2P - (2P + 2Q + 1)y] \frac{d}{dy} - (P + Q + \mu)(P + Q - \mu) \right] \varphi(y) = 0. \quad (25)$$

Proceeding in the same way as for the case where $q < 0$, the solution of (25), for which $u(r)$ fulfills the boundary conditions (17) and (18), can be written

$$\varphi(y) = N {}_2F_1(P + Q + \mu, P + Q - \mu, 2P; 1 - qe^{-\alpha r}), \quad (26)$$

where P , Q and μ are similarly given by Eqs. (11) and (19). N denotes a constant factor. The wave function satisfying

Eqs. (2), (17) and (18) is thus given by (24) and (26) as

$$u(r) = N(1 - qe^{-\alpha r})^P (qe^{-\alpha r})^Q \times {}_2F_1(P + Q + \mu, P + Q - \mu, 2P; 1 - qe^{-\alpha r}). \quad (27)$$

Then, the energy levels can be found from a numerical solution of the transcendental equation

$${}_2F_1(P + Q + \mu, P + Q - \mu, 2P; 1 - q) = 0. \quad (28)$$

The previous analysis reveals that the superpotential $W(r) = \frac{-A}{e^{\alpha r} - q} + B$ given by Eq. (GC 10) is an acceptable choice if, and only if $A > 0$, $B > 0$ and $q \geq 1$. This means that these constraints on the parameters A , B and q ensure the hermiticity of the operator P_r and as consequence the square integrability of the ground state wave function $u_0(r)$. From this requirement it is possible to cast the effective potential $V_{\text{eff}}(r) = \frac{\gamma}{(e^{\alpha r} - q)^2} - \frac{\beta}{e^{\alpha r} - q}$ given by Eq. (GC 9) into supersymmetric form. Otherwise the supersymmetric quantum mechanical method cannot be applied.

References

- [1] G. Chen, Z.-D. Chen, Z.-M. Lou, Phys. Lett. A 331 (2004) 374.
- [2] F. Dominguez-Adame, Phys. Lett. A 136 (1989) 175.
- [3] L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T.F. Hammann, A. Messouber, Physica A 234 (1996) 529.



Comment

Comment on: “Any l -state solutions of the Klein–Gordon equation with the generalized Hulthén potential”

F. Benamira, L. Guechi*, A. Zouache

Laboratoire de Physique Théorique, Département de Physique, Université Mentouri, Route d'Ain El Bey, Constantine, Algeria

ARTICLE INFO

Article history:

Received 4 June 2008

Accepted 18 September 2008

Available online 31 October 2008

Communicated by V.M. Agranovich

PACS:

03.65.Ge

03.65.Pm

Keywords:

Generalized Hulthén potential

Klein–Gordon equation

Bound states

ABSTRACT

It is shown that the bound l -state solutions of the Klein–Gordon equation for the general scalar and vector Hulthén potentials obtained by Qiang et al. are valid only for $q \geq 1$ and $\frac{1}{\alpha} \ln q < r < \infty$. We clarify the problem and give the correct solutions when $0 < q < 1$ or $q < 0$. In each case, we derive a transcendental quantization condition for the s -state energy levels.

© 2008 Elsevier B.V. All rights reserved.

In a recent Letter, Qiang and co-workers [1] have approached the problem of a charged spinless particle in the presence of a scalar potential $S_q(r)$ and a vector potential $V_q(r)$ of the form

$$S_q(r) = -\frac{S_0}{e^{\alpha r} - q}, \quad V_q(r) = -\frac{V_0}{e^{\alpha r} - q}, \quad (1)$$

where α , S_0 and V_0 are positive constants such that $S_0 > V_0$ and q is a deformation parameter which can take any real value. The time-independent radial Klein–Gordon equation (with natural units $\hbar = c = 1$) is

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + (E - V_q(r))^2 - (M + S_q(r))^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0, \quad (2)$$

where M denotes the mass, E is the bound-state energy, $u_l(r) = r\psi_l(r)$ and $\psi_l(r)$ is the radial wave function.

To solve this equation approximately for any l , the authors have made the substitution $\frac{1}{r^2} \approx \frac{\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2}$ in the centrifugal term. Therefore, Eq. (2) has been rewritten as

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(E + \frac{V_0}{e^{\alpha r} - q} \right)^2 - \left(M - \frac{S_0}{e^{\alpha r} - q} \right)^2 - \frac{\alpha^2 l(l+1)e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} \right] u_l(r) = 0. \quad (3)$$

In this comment, we would like to point out that they have made numerous mistakes in the afore-mentioned work.

On the one hand, their solutions are not acceptable for all real values of the parameter q and for $r \in \mathbb{R}^+$. It is obvious that the potentials (1) have a strong singularity at the point $r = r_0 = \frac{1}{\alpha} \ln q$, for $q \geq 1$. Furthermore, we see that the quantization condition given by Eq. (14) in Ref. [1], holds only for $q > 0$. Otherwise, $a \neq -n$ since a is a positive quantity.

On the other hand, in order to ensure the hermiticity of the radial momentum operator $\hat{P}_r = -i\frac{\partial}{r\partial r}r$, the solution of Eq. (7) in Ref. [1] must satisfy the boundary conditions

$$u_l(r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} 0, \quad (4)$$

and

$$u_l(r_0) = 0 \quad \text{if } q \geq 1, \quad (5)$$

or

$$u_0(0) = 0 \quad \text{if } q < 1, \quad (6)$$

contrary to the statement of Qiang and co-workers [1].

On the basis of the above considerations, a rigorous discussion of this problem needs to distinguish at least four cases. The fifth concerns the value $q = 0$. It can be considered as limiting case in forthcoming paper.

(i) $q \geq 1$ and $r_0 < r < \infty$.

In this case, the solution of Eq. (3) is identical with that obtained by Qiang and co-workers [1]. It can be expressed in terms

DOI of original article: 10.1016/j.physleta.2007.04.109.

* Corresponding author.

E-mail address: guechilarbi@yahoo.fr (L. Guechi).

of the Jacobi polynomials (see formula (8.962.1) in Ref. [2]) as

$$u_l(r) = N_{n_r,l} (1 - qe^{-\alpha r})^\delta q^{\epsilon_{n_r,l}} e^{-\alpha \epsilon_{n_r,l} r} P_{n_r}^{(2\epsilon_{n_r,l}, 2\delta-1)}(1 - 2qe^{-\alpha r}), \quad (7)$$

where

$$\begin{cases} \delta = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{v^2}{q^2} + \frac{l(l+1)}{q}}, \\ \beta = \frac{1}{\alpha} \sqrt{2(MS_0 + E_{n_r,l}V_0)}, \\ v = \frac{1}{\alpha} \sqrt{S_0^2 - V_0^2}, \\ \epsilon_{n_r,l} = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M^2 - E_{n_r,l}^2} = \frac{\beta^2 - q[n_r^2 + (2n_r+1)\delta] - l(l+1)}{2q(n_r+\delta)}. \end{cases} \quad (8)$$

The normalization constant $N_{n_r,l}$ in (7) can be determined from the normalization condition

$$\int_{r_0}^{\infty} |u_l(r)|^2 dr = 1. \quad (9)$$

Using formulas (7.391.1) and (7.391.5) of Ref. [2], we find after some simple calculation that

$$N_{n_r,l} = \left[2\alpha \frac{\epsilon_{n_r,l}(n_r + \epsilon_{n_r,l} + \delta)}{n_r + \delta} \frac{n_r! \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r,l} + 2\delta)}{\Gamma(n_r + 2\delta) \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r,l} + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (10)$$

When we take $n_r = 0$, the normalized wave function of the ground state is then

$$u_g(r) = \left[2\alpha \frac{\epsilon_g(\epsilon_g + \delta)}{\delta} \frac{\Gamma(2\epsilon_g + 2\delta)}{\Gamma(2\delta)\Gamma(2\epsilon_g + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \times q^{\epsilon_g} (1 - qe^{-\alpha r})^\delta e^{-\alpha \epsilon_g r}. \quad (11)$$

A comparison between our Eq. (11) and Eq. (30) of Ref. [1] shows that the result derived by Qiang and co-workers [1] is also incorrect.

Besides, it may be observed that the approximation for the centrifugal term which consists in using $\frac{1}{r^2} \approx \frac{\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2}$ is not applicable in the cases where $0 < q < 1$ or $q < 0$.

(ii) $q \geq 1$ and $0 < r < r_0$.

The solution of Eq. (3) cannot be obtained analytically.

(iii) $0 < q < 1$ and $r \in \mathbb{R}^+$.

To solve the Klein–Gordon equation (3) for $l = 0$, we introduce the new variable

$$y = 1 - qe^{-\alpha r}, \quad (12)$$

and we look for a solution in the form

$$u_0(r) = y^\delta (1 - y)^\epsilon \varphi(y), \quad (13)$$

in which, on account of the boundary conditions (4) for $l = 0$ and (6), ϵ and δ have to be positive. Substituting (12) and (13) into (3) and using the following abbreviations

$$\begin{cases} \epsilon = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M^2 - E^2}, \\ v = \frac{1}{\alpha} \sqrt{S_0^2 - V_0^2}, \\ \beta = \frac{1}{\alpha} \sqrt{2(MS_0 + EV_0)}, \\ Q = \sqrt{\epsilon^2 + \frac{\beta^2}{q} + \frac{v^2}{q^2}}, \\ \delta = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{v^2}{q^2}} \end{cases} \quad (14)$$

we obtain the following hypergeometric differential equation

$$\left[y(1 - y) \frac{d^2}{dy^2} + [2\delta - (2\delta + 2\epsilon + 1)y] \frac{d}{dy} - (\delta + \epsilon - Q)(\delta + \epsilon + Q) \right] \varphi(y) = 0. \quad (15)$$

The solution of this equation, for which the boundary condition (4) for $l = 0$ is fulfilled, can be written

$$\varphi(y) = N {}_2F_1(\delta + \epsilon - Q, \delta + \epsilon + Q, 2\delta; y), \quad (16)$$

where N is a constant factor. Thus, according to (12), the solution of the radial Klein–Gordon equation (3) is given by (13) and (16) as

$$u_0(r) = N (1 - qe^{-\alpha r})^\delta (qe^{-\alpha r})^\epsilon \times {}_2F_1(\delta + \epsilon - Q, \delta + \epsilon + Q, 2\delta; 1 - qe^{-\alpha r}). \quad (17)$$

In order to find the possible energies for the bound states, we use the boundary condition (6). The solution (17) fulfills the condition (6) when

$${}_2F_1(\delta + \epsilon - Q, \delta + \epsilon + Q, 2\delta; 1 - q) = 0. \quad (18)$$

Then, the energy values are given by the solution of this transcendental equation (18) which can be solved numerically.

(iv) $q < 0$ and $r \in \mathbb{R}^+$.

The discussion will differ slightly from the above analysis by making the substitution $y = \frac{q}{q - e^{\alpha r}}$, and setting

$$u_0(r) = y^\epsilon (1 - y)^Q \varphi(y). \quad (19)$$

For $\varphi(y)$ the following hypergeometric equation is obtained

$$\left[y(1 - y) \frac{d^2}{dy^2} + [2\epsilon + 1 - (2\epsilon + 2Q + 2)y] \frac{d}{dy} - (1 + \epsilon + Q - \delta)(\epsilon + Q + \delta) \right] \varphi(y) = 0. \quad (20)$$

Proceeding in the same way as for the case where $0 < q < 1$, the solution of (20), for which $u_0(r)$ fulfills the boundary conditions (4) for $l = 0$ and (6), can be written

$$\varphi(y) = N {}_2F_1(1 + \epsilon + Q - \delta, \epsilon + Q + \delta, 2\epsilon + 1; y), \quad (21)$$

where ϵ , Q and δ are similarly given by Eqs. (14). The wave function satisfying Eqs. (3), (4) for $l = 0$ and (6) is thus given by (19) and (21) as

$$u_0(r) = N \left(\frac{q}{q - e^{\alpha r}} \right)^\epsilon \left(\frac{1}{1 - qe^{-\alpha r}} \right)^Q \times {}_2F_1\left(1 + \epsilon + Q - \delta, \epsilon + Q + \delta, 2\epsilon + 1; \frac{q}{q - e^{\alpha r}}\right). \quad (22)$$

Then, the energy levels can be found from a numerical solution of the transcendental equation

$${}_2F_1\left(1 + \epsilon + Q - \delta, \epsilon + Q + \delta, 2\epsilon + 1; \frac{q}{q - 1}\right) = 0. \quad (23)$$

To conclude, due to the above shown obvious errors in solving the Klein–Gordon equation, the energy eigenvalues and eigenfunctions derived by Qiang et al. are satisfactory only for $q \geq 1$ and $\frac{1}{\alpha} \ln q < r < \infty$. For $0 < q < 1$ or $q < 0$, the bound state energy levels are determined by a transcendental equation involving the hypergeometric function.

References

[1] W.C. Qiang, R.S. Zhou, Y. Gao, Phys. Lett. A 371 (2007) 201.
 [2] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, Tables of Integrals, Series and Products, Academic Press, New York, 1969.

Conclusion

Notre travail s'est articulé autour de deux grandes parties. Dans la première partie, nous avons présenté les solutions de l'équation de Schrödinger ou de l'équation de Klein-Gordon pour différents systèmes dynamiques intéressant la physique théorique et la chimie quantique.

Dans un premier volet, nous avons d'abord traité le cas du potentiel à quatre paramètres. Il s'agit là d'une présentation détaillée qui tient compte de toutes les valeurs réelles possibles du paramètre de déformation λ . Nous avons montré qu'une solution unifiée du problème est impossible du fait que la forme du potentiel dépend du paramètre λ . Pour $\lambda > 0$, on a un potentiel général du type Hulthén qui présente une forte singularité au point $r = r_0 = \frac{1}{\eta} \ln \lambda$ dans le cas où $\lambda \geq 1$. Si $\lambda < 0$, c'est un potentiel général du type Woods-Saxon et lorsque $\lambda = 0$, il s'agit du potentiel de Morse radial. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des états liés ont été obtenus dans chaque cas. Il faut souligner que les niveaux d'énergie sont définis par une équation transcendante comprenant une fonction hypergéométrique pour $\lambda < 0$ et $0 < \lambda < 1$.

Nous avons ensuite étudié le système de Manning et Rosen. Les niveaux d'énergie, les fonctions d'ondes convenablement normalisées et le nombre des états liés ont été déterminés. Nous avons également obtenus les fonctions d'onde et les déphasages des états de diffusion. Le potentiel de Hulthén a été considéré comme cas particulier.

Un deuxième volet concerne la résolution de l'équation de Klein-Gordon pour une particule soumise à un potentiel vecteur et un potentiel scalaire généralisant le potentiel de Hulthén ou celui de Woods-Saxon. Le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes des états s sont donnés dans tous les cas possibles. Nous avons ensuite examiné l'extension de ce traitement au cas des ondes $l \neq 0$ au moyen d'une expression approximative du potentiel centrifuge valable pour $q \geq 1$.

La seconde partie réunit quatre commentaires sur les méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger ou de Klein-Gordon, concernant les systèmes dynamiques en question, présentées dans la littérature. Dans chaque cas, nous avons clarifié le problème et construit des solutions correctes.

Pour terminer, il faut souligner que l'état actuel du développement du formalisme de la supersymétrie en mécanique quantique ne permet pas une analyse complète de certains types de potentiels.

Bibliographie

- [1] H. Yukawa, Proc. Phys. Math. Soc. Jpn 17 (1935) 48
- [2] C. Möller and L. Rosenfeld, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. XVII, n° 8 (1940).
- [3] N. Bohr, Mat. Fys. Medd. Vid. Selsk. XVIII, n° 8 (1948).
- [4] A. H. Wilson, Proc. Cambridge philos. Soc. 34 (1938) 365.
- [5] R. Sachs and M. Goeppert-Mayer, Phys. Rev, 53 (1938) 991.
- [6] E. A. Hylleraas and V. Risberg, Avh. Nor. Vidensk. Akad. Oslo Mat. Naturvidensk. KI. 1, n°3 (1941).
- [7] L. Hulthén, Ark. Mat. Astron. Fys. A 28, n° 5 (1942).
- [8] I. Lindhard and A. Winther, Nucl. Phys. A 166 (1971) 413.
- [9] S. G. M. Gustavi, Ark. Fys. 11 (1957) 437.
- [10] C. Rosenzweig and J. B. Krieger, J. Math. Phys. 9 (1968) 849.
- [11] N. Fröman and P. O. Fröman, JWKB Approximation, contributions to the theory (North-Holland, Amsterdam, 1965).
- [12] L. Infeld and T. E. Hull, Rev. Mod. Phys. 23 (1951) 21.
- [13] A. Arai, J. Math. Anal. Appl. 158 (1991) 63.
- [14] P. M. Morse, Phys. Rev. 34 (1929) 57.
- [15] J. L. Dunham, phys. Rev. 41 (1932) 721.
- [16] S. Flügge, Practical Quantum Mechanics (Berlin : Springer 1974).
- [17] T. F. Hammann, G. Obertechnner, G. Trapp and J. Yoccoz, J. Physique 28 (1967) 755 ;
T.F. Hammann and Q. Ho-Kim, Nuovo cimento 64 B (1969) 367 ; T. F. Hammann, P.
Desgrolard and L. Chetouani, Nuovo Cimento 29A (1975) 19.

- [18] P. Desgrolard and T. F. Hammann, *Phys. Rev. C* 6 (1972) 482.
- [19] Jiu-Xun Sun, *Acta Phys. sin.* 48 (1999) 1992.
- [20] R. Rydberg, *Z. Phys.* 73 (1931) 376.
- [21] O. Klein, *Z. Phys.* 76 (1932) 226.
- [22] A. L. G. Rees, *Proc. Roy. Soc. London* 59 (1947) 998.
- [23] C. S. Jia, J. Y. Wang, S. He and L. T. Sun, *J. Phys. A : Math. Gen.* 33 (2000) 6993.
- [24] F. Benamira, L. Guechi and A. Zouache, *J. Phys. A : Math. Theor.* 40 (2007) 4915.
- [25] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic Press, New York, 1965).
- [26] R. D. Woods and D. S. Saxon, *Phys. Rev* 95 (1954). 577.
- [27] L. D. Landau and E. M. Lifchitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).
- [28] M. F. Manning and N. Rosen, *Phys. Rev.* 44 (1933) 953.
- [29] S. H. Dong and J. Garcia-Ravelo, *Phys. Scr.* 75 (2007) 307.
- [30] J. M. Cai, P.Y. Cai and A. Inomata, *Phys. Rev. A* 34 (1986) 4621.
- [31] O. P. Bahethi and M. G. Fuda, *J. Math. Phys.* 12 (1971) 2076 ;
- [32] B. Durand and L. Durand, *Phys. Rev. D* 23 (1981) 1092 ; C. S. Lam and Y. P. Varshni, *Phys. Rev A* 4 (1971) 1874 ; H. Van Haeringen, *Phys. Rev. A* 18 (1978) 56 ; R. Dutt and P. Varshni, *J. Math. Phys.* 24 (1983) 2770 ; L. Hall, *Phys. Rev. A* 32 (1985) 14.
- [33] J. Gruninger, *J.Chem. Phys.* 55 (1971)3561 ; J. Lindhard and A. Winther, *Nucl. Phys. A* 166 (1971) 413 ; K. Szalczewicz and H. J. Mokhorst, *J. Chem. Phys.* 75 (1981)5785 ; G. Malli, *Chem. Phys. Lett.* 26 (1981) 578 ; U. Myhrman, *J. Math. Phys.* 21 (1980) 1732 ; *J. Phys. A : Math. Gen.* 16 (1983) 263.
- [34] A. A. Berezni, *Phys. Stat. Sol. (b)* 50 (1972) 71 ; *J. Phys. C* 12, (1979) L363 ; *Phys. Rev. B* 33 (1986) 2122.
- [35] F. Dominguez Adam, *Phys. Lett. A.* 136 (1989) 175.
- [36] L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T.F. Hamman and A. Messouber, *Physica A* 234 (1996) 289.

- [37] M. Simsek and H. Egrifes, *J. Phys. A : Math. Gen.* 37 (2004) 4379.
- [38] H. Egrifes and R. Sever, *Int. J. Theor. Phys.* 46 (2007) 935.
- [39] G. Chen, Z. D. Chen and Z. M. Lou, *Phys. Lett. A* 331 (2004) 374.
- [40] E. Olgar, R. Koç and Tütüncüler, *Phys. Scr.* 78 (2008) 015011.
- [41] G. Chen, *Phys. Lett. A* 339 (2005) 300.
- [42] F. Taskin, I. Boztosun and O. Bayrak ; *Int. J. Theor. Phys.* DOI 10-2007/s 10773-007-3603-0.
- [43] W. C. Qiang, R. S. Zhou and Y. Gao, *Phys. Lett. A* 371 (2007) 201 ; *Phys. Lett. A* 373 (2009) 299.
- [44] N. Saad, *Phys. Scr.* 76 (2007) 623.

Abstract

This work is concerned with a complete analysis of a set of dynamical systems defined by general forms of potentials widely used in many branches of physics and in quantum chemistry.

In the framework of the non relativistic quantum mechanics, we have first studied the problem of four parameter potential proposed recently to describe inter-atomic interactions in the diatomic molecules. Next, we have treated the Manning and Rosen potential. In the both cases, the exact energy spectrum and the wave functions are obtained.

In the context of the relativistic quantum mechanics, we have discussed the behaviour of the solutions of the Klein-Gordon equation for charged particle in presence of vector and scalar potentials depending on a deformation parameter q by restricting ourself to the s waves. We have shown that it is possible to extend to the waves $l \neq 0$ by means of an appropriate approximation of the centrifugal potential in the case corresponding to $q \geq 1$.

Keywords: deformed potentials, Schrödinger equation, Klein-Gordon equation, energy spectrum, wave functions, shifts, bound states, scattering states.

ملخص

يتعلق هذا العمل بتحليل كامل لمجموعة جمل ديناميكية معرفة بصيغ عامة لكمونات مستعملة بشكل واسع في كثير من فروع الفيزياء وفي الكيمياء الكمية.

في إطار الميكانيك الكمي غير النسبي، درسنا أولاً مسألة كمون ذي أربعة ثوابت محددة اقترح حديثاً لوصف تفاعلات ما بين الذرات في الجزيئات ثنائية الذرة. بعدها، عالجتنا كمون مانيج وروزن. في كلتي الحالتين، حصلنا على طيف الطاقة التام ودوال الموجة.

وفي نطاق الميكانيك الكمي النسبي، ناقشنا تصرف حلول معادلة كلاين-غوردن المتحركة في حركة جسيم مشحون في حضور كمون شعاعي وكمون لا موجّه متعلقين بثابت تشويه q . وقد اقتصر نقاشنا على الموجات s . بيّننا بعد ذلك، أنه يمكن تمديد الدراسة إلى الأمواج $l \neq 0$ وذلك بواسطة تقريب مناسب للكمون المركزي الطارد في الحالة المتعلقة بـ $q \geq 1$.

الكلمات المفتاحية: كمون مشوه، معادلة شرودينجر، معادلة كلاين-غوردن، طيف الطاقة، دوال الموجة، تغيير الطور، حالات مرتبطة، حالات الانتشار.

Résumé

Ce travail concerne une analyse complète d'un ensemble de systèmes dynamiques définis par des formes générales de potentiels largement utilisées dans plusieurs branches de la physique et en chimie quantique.

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, nous avons d'abord étudié le problème d'un potentiel à quatre paramètres proposé récemment pour décrire des interactions inter-atomiques dans les molécules diatomiques. Ensuite, nous avons traité le potentiel de Manning et Rosen. Dans les deux cas, le spectre d'énergie exact et les fonctions d'onde sont obtenus.

Dans le contexte de la mécanique quantique relativiste, nous avons discuté le comportement des solutions de l'équation de Klein-Gordon régissant le mouvement d'une particule chargée en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire dépendant d'un paramètre de déformation q en nous limitant aux ondes s . Nous avons montré qu'il est possible d'étendre l'étude aux ondes $l \neq 0$ au moyen d'une approximation appropriée du potentiel centrifuge dans le cas correspondant à $q \geq 1$.

Mots clés : potentiels déformés, équation de Schrödinger, équation de Klein-Gordon, spectre d'énergie, fonctions d'onde, déphasages, états liés, états de diffusion.