UNIVERSITÉ DU BURUNDI
GRENIER DU SAVOIR DU BURUNDI
Dépôt institutionnel officiel
https://repository.ub.edu.bi

Résolution numérique de l’équation de schrodinger pour l’atome d’hydrogène expose à un champ laser : utilisation de la méthode spectrale de galerkin et des méthodes de fatunla

Habonimana, Salvator; Sous la direction de Prof. Hippolyte NYENGERI

2023-03
UB
https://repository.ub.edu.bi/handle/123456789/452

Document téléchargé depuis le **Grenier du Savoir du Burundi** — https://repository.ub.edu.bi

UNIVERSITE DU BURUNDI
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE
CENTRE DE RECHERCHE EN SCIENCES MATHEMATIQUES ET PHYSIQUE

RESOLUTION NUMERIQUE DE L'EQUATION DE SCHRODINGER POUR L'ATOME D'HYDROGENE EXPOSE A UN CHAMP LASER : UTILISATION DE LA METHODE SPECTRALE DE GALERKIN ET DES METHODES DE FATUNLA

Par :

Salvator HABONIMANA

Mémoire présenté et défendu publiquement en vue de l'obtention du Diplôme de Master en Physique fondamentale et appliquée.
Option : Physique fondamentale

Sous la direction de :
Prof. Hippolyte NYENGERI

Bujumbura, Mars 2023

Composition du Jury

Professeur Sébastien NIYONZIMA : *Président du Jury*

Docteur Réné SIMBIZI : *Secrétaire du Jury*

Professeur Rachel AKIMANA : *Membre*

Professeur Hippolyte NYENGERI : *Directeur de Mémoire*

DÉDICACE

A

mes parents,

ma femme,

mes Sœurs,

mes camarades de Master

et

toutes mes connaissances

REMERCIEMENTS

Avant toutes choses, je signale que ce travail n'est pas seulement le fruit de mes seuls efforts raison pour laquelle je présente mes sentiments à toutes personnes qui ont contribué à sa réalisation.

Mes sincères remerciements s'adressent au Professeur NYENGERI Hippolyte, de l'Université du Burundi, qui malgré ses occupations a accepté de diriger ce mémoire. Ses précieux conseils, sa disponibilité, sa rigueur scientifique et ses suggestions m'ont été d'une grande utilité ; qu'il trouve ici l'expression de ma profonde et respectueuse gratitude.

Je remercie également tous les membres du jury pour le temps qu'ils ont consacré à la lecture de ce travail ; leurs précieux commentaires pour l'amélioration de ce travail me seront d'une importance capitale.

Mes sentiments de reconnaissance sont également dirigés à l'endroit de tous ceux qui ont contribué à ma formation depuis le cycle primaire jusqu'à l'Université du Burundi et plus particulièrement tous les professeurs de la Facultés des Sciences surtout ceux des départements de mathématiques et physique. Qu'ils trouvent ici ma profonde gratitude pour m'avoir doté d'une formation tant humaine que scientifique de haut niveau.

J'exprime ma vive reconnaissance envers mes parents pour leur support tant matériel que moral et leur encouragement depuis l'école primaire à nos jours, qu'ils trouvent ici le fruit de leurs efforts.

Résumé

Notre travail s'intéresse à l'équation de Schrödinger dépendante du temps (ESDT) pour l'atome d'hydrogène en interaction avec un champ laser. La résolution de cette équation n'est généralement pas réalisable analytiquement. Elle requiert l'introduction d'approximations et est effectuée à l'aide des méthodes numériques.

Parmi les approximations que nous avons utilisées figurent l'approximation du noyau infiniment lourd et l'approximation dipolaire électrique (approximations des grandes longueurs d'onde). Les méthodes numériques utilisées pour résoudre l'ESDT en question sont la méthode spectrale de Galerkin fondée sur le développement de la fonction d'onde sur une base finie de fonctions sturmiennes coulombiennes, la méthode de Fatunla explicite, la méthode de Fatunla implicite et une méthode prédicteur-correcteur construite à partir de ces deux méthodes de Fatunla.

Nous avons tout d'abord présenté quelques éléments importants concernant les fonctions sturmiennes coulombiennes. Nous avons ensuite utilisé ces fonctions dans la résolution de l'équation de Schrödinger de l'atome d'hydrogène en l'absence du champ laser, au moyen de la méthode spectrale de Galerkin. Cette équation est résolvable analytiquement. Nous avons trouvé que les énergies des premiers états liés obtenues numériquement coïncident avec celles analytiques. Le même constat a été fait sur les fonctions d'onde normalisées des états liés de l'atome d'hydrogène, ce qui prouve que la base sturmienne considérée est adéquate. Enfin, nous avons introduit la méthode de Fatunla explicite, la méthode de Fatunla implicite, et une nouvelle méthode que nous avons nommée méthode de Fatunla modifiée. Ces méthodes ont été testées sur un système différentiel modèle et sur l'ESDT décrivant l'atome d'hydrogène exposé à un champ laser.

Pour valider le code informatique que nous avons mis au point, nous avons fait une étude des oscillations de Rabi qui se présentent lorsque le champ laser est périodique dans le temps. Nous avons trouvé que la période de Rabi théorique coïncide suffisamment avec celle obtenue à partir des résultats numériques.

Mots clés : atome d'hydrogène, équation de Schrödinger, champ laser, fonctions sturmiennes coulombiennes, méthode spectrale de Galerkin, méthodes de Fatunla.

Abstract

In our work, we are interested in the time-dependent Schrödinger equation (TDSE) for the hydrogen atom in interaction with a laser field. Solving this equation is generally not analytically feasible. It requires the introduction of approximations and is performed using numerical methods.

Among the approximations we have used are the kernel approximation infinitely heavy and the electric dipole approximation (long wavelength approximation). The numerical methods used to solve the TDSE in question are the Galerkin spectral method based on the expansion of the wave function on a finite basis of coulombian sturmian functions, the explicit Fatunla method, the implicit Fatunla method and a predictor-corrector method built from these two Fatunla methods.

We first presented some important elements concerning coulombian sturmian functions. We then used these functions in the resolution of the Schrödinger equation of the hydrogen atom in the absence of the laser field, by means of the Galerkin spectral method. This equation is analytically solvable. We have found that the energies of the first bound states obtained numerically coincide with the analytical ones. The same observation was made on the normalized wave functions of the bound states of the hydrogen atom, which proves that the sturmian basis considered is adequate. Finally, we introduced the explicit Fatunla method, the implicit Fatunla method and a new method that we named the modified Fatunla method. These methods were tested on a model differential system and on the TDSE describing the hydrogen atom exposed to a laser field.

To validate the computer code that we have developed, we have made a study of the Rabi oscillations that occur when the laser field is periodic in time. We found that the theoretical Rabi period coincides sufficiently with that obtained from the numerical results.

Keywords : hydrogen atom, Schrödinger equation, laser field, coulombian sturmian functions, Galerkin spectral method, Fatunla methods.

Table des matières

Membres du Jury **i**

Dédicace **ii**

Remerciements **iii**

Résumé **iv**

Abstract **v**

Table des matières **vi**

Liste des tableaux **ix**

Table des figures **x**

Liste des sigles et abréviations **xi**

Avant-propos **xii**

Introduction générale **1**

1 Les fonctions sturmiennes **4**

1.1 Introduction 4

1.2 Le problème de Sturm-Liouville 4

1.2.1 Définition 4

1.2.2 Propriétés des solutions d'un problème de Sturm-Liouville 5

1.2.3 Les fonctions sturmiennes coulombiennes 7

1.2.4 Les éléments de matrice 13

1.2.5 Les fonctions Sturmiennes complexes 13
1.2.6 Comportement des sturmiennes 20

2 Résolution de l'équation de Schrödinger pour un atome d'hydrogène en l'absence du champ laser : utilisation de la méthode spectrale de Galerkin 22

2.1 Introduction 22
2.2 Les valeurs propres et les fonctions d'onde exactes de l'équation de Schrödinger 24
2.3 Solutions numériques de l'équation de Schrödinger : la méthode spectrale de Galerkin 26
2.4 Résultats des simulations numériques 27
2.4.1 Les énergies 27
2.4.2 Les fonctions d'ondes normalisées 31
2.5 Spectre du hamiltonien atomique dilaté 34

3 Résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps en présence du champ laser 38

3.1 Introduction 38
3.2 Equation de Schrödinger dépendante du temps (ESDT) 38
3.3 Formulation matricielle de l'ESDT : utilisation de la méthode spectrale de Galerkin 39
3.4 Caractère raide du problème 44
3.5 La méthode de Fatunla explicite 45
3.6 Méthode de Fatunla implicite 48
3.7 Schéma prédicteur-correcteur : la méthode de Fatunla modifiée. 49
3.7.1 Introduction 49
3.7.2 Principe 50
3.7.3 Exemple 50
3.8 Résultats des simulations numériques 51
3.8.1 Cas d'un système modèle 51
3.8.2 Cas de l'atome d'hydrogène en présence d'un champ laser 56

Conclusion générale et recommandation 59

A Les approximants de Padé **60**

A.1 Définition des approximants de Padé 60

A.2 Propriétés des approximants de Padé 63

B Algorithme epsilon de Wynn **65**

B.1 Introduction : Convergence des suites 65

B.2 La transformation de Shanks 66

B.3 Transformation de Shanks et approximants de Padé 67

B.4 L'algorithme epsilon 67

B.5 L'algorithme epsilon et la transformation de Shanks 69

C Calcul analytique de la fréquence et de la période de Rabi **70**

Bibliograhie **73**

Liste des tableaux

1.1 Vérification de la relation de fermeture pour les fonctions sturmiennes réelles 12

1.2 $1^{ère}$ Colonne : nombre de Sturmiennes, $2^{ème}$ et $3^{ème}$ Colonnes : parties réelle et imaginaire de la valeur de e^{ikr} pour $k = 0.5$, $r = 4$, $\kappa_c = 0.3 - 0.15\,i$ et $N_r = 50$. 16

1.3 $1^{ère}$ Colonne : nombre de Sturmiennes, $2^{ème}$ et $3^{ème}$ Colonnes : parties réelle et imaginaire de la valeur de e^{ikr} pour $k = 0.5$, $r = 4$, $\kappa_c = 0.3 + 0.15\,i$ et $N_r = 50$. 17

1.4 $1^{ère}$ Colonne : nombre de Sturmiennes, $2^{ème}$ et $3^{ème}$ Colonnes : parties réelle et imaginaire de de la valeur de e^{ikr} obtenue en utilisant les approximants de Padé pour $k = 0.5$, $r = 4$, $\kappa_c = 0.3 + 0.15\,i$ et $N_r = 50$. 18

2.1 Colonne de gauche : les valeurs de n, colonne du milieu et colonne de droite : les énergies propres obtenues numériquement et analytiquement respectivement. $N = 40$,$\kappa = 0.2$ et $\ell = 0$. 28

2.2 Colonne de gauche : nombre d'itération, colonne du milieu et colonne de droite : les énergies propres obtenues numériquement et analytiquement respectivement dans le cas où $N = 400$, $\ell = 10$ et $\kappa = 0.02$. 29

3.1 Résultats obtenus pour l'exemple (3.60) en utilisant les méthodes de Fatunla explicite, Fatunla implicite et Fatunla modifiée. 55

A.1 Table de Padé pour l , $m = 0$, 1 , $\ldots$, 4. 62

B.1 Tableau ϵ 68

Table des figures

1.1 Variation de $|f_n(r)-e^{ikr}|$ en fonction de n dans le cas particulier où $k = 0.5$ et $\kappa =\mid \kappa \mid e^{i\theta}$ avec $\mid \kappa \mid = 0.33$, $\theta = 0.75rad$, $n = 2, 3, ..., 50$ et $r = 0.4$ 19

1.2 Variation de $\max_{r\in[r_i,r_f]} |f_n(r) - e^{ikr}|$ en fonction de n 19

1.3 Comportement des fonctions sturmiennes lorsque l'indice n varie avec κ et l fixés. 20

1.4 Comportement des fonctions sturmiennes lorsque l'indice κ varie avec n et l fixés. 21

2.1 Graphes $R^{num}_{10}(r)$, $R^{e}_{10}(r)$, $R^{num}_{20}(r)$, $R^{e}_{20}(r)$, $R^{num}_{21}(r)$, $R^{e}_{21}(r)$, $R^{num}_{30}(r)$, $R^{e}_{30}(r)$ en (a) ; $R^{num}_{31}(r)$, $R^{e}_{31}(r)$, $R^{num}_{32}(r)$, $R^{e}_{32}(r)$, $R^{num}_{40}(r)$, $R^{e}_{40}(r)$, $R^{num}_{41}(r)$, $R^{e}_{41}(r)$ en (b). 32

2.2 Graphes $R^{num}_{42}(r)$, $R^{e}_{42}(r)$, $R^{num}_{43}(r)$, $R^{e}_{43}(r)$, $R^{num}_{50}(r)$, $R^{e}_{50}(r)$, $R^{num}_{51}(r)$, $R^{e}_{51}(r)$ en (a) ; $R^{num}_{52}(r)$, $R^{e}_{52}(r)$, $R^{num}_{53}(r)$, $R^{e}_{53}(r), R^{num}_{54}(r)$, $R^{e}_{54}(r)$ en (b). 33

2.3 Spectre de $\hat{H}_0(\theta)$ lors de l'utilisation d'une dilatation complexe. $\ell = 0$, $\kappa = 0.4$, $N = 1000$ et $\theta = 0.1\ rad$ 35

2.4 Spectre de $\hat{H}_0(\theta)$ lors de l'utilisation d'une dilatation complexe. $\ell = 0$, $\kappa = 0.4$, $N = 1000$ et $\theta = 0.15\ rad$ 36

2.5 Spectre de $\hat{H}_0(\theta)$ lors de l'utilisation d'une dilatation complexe. $\ell = 0$, $\kappa = 0.4$, $N = 1000$ et $\theta = 0.3\ rad$ 36

2.6 Spectre de $\hat{H}_0(\theta)$ lors de l'utilisation d'une dilatation complexe. $\ell = 0$, $\kappa = 0.4$, $N = 1000$ et $\theta = 0.6\ rad$ 37

3.1 Evolution de la population dans les états $|\Psi_{100}\rangle$ et $|\Psi_{210}\rangle$ pour $I = 10^{13}\ W/cm^2$ 57

3.2 Evolution de la population dans les états $|\Psi_{100}\rangle$ et $|\Psi_{210}\rangle$ pour une intensité $I = 10^{12}\ W/cm^2$. 58

3.3 Evolution de la population dans l'état fondamental (initial) de l'atome d'hydrogène 58

Liste des sigles et abréviations

- ESDT : Equation de Schrödinger Dépendante du Temps
- LASER : Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation
- LAPACK : Linear Algebra Package
- TDSE : Time-Dependent Schrödinger Equation

Avant-propos

Le présent travail de mémoire a été réalisé dans le cadre de l'obtention du diplôme de fin d'étude du deuxième cycle des enseignements de l'Université du Burundi.

L'objectif de ce mémoire est de résoudre numériquement l'équation de Schrödinger pour un atome d'hydrogène lorsqu'il est en présence du champ laser.

De nombreux efforts ont été faits pour développer des méthodes numériques de résolution pour une telle équation, entre autres les méthodes spectrales d'où l'utilisation de la méthode spectrale de Galerkin.

En effet, cette équation est en général très difficile à résoudre analytiquement, on fait par conséquent appel à l'introduction d'approximations et est effectuée à l'aide des méthodes numériques. Ici nous présentons deux méthodes pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour un atome d'hydrogène en interaction avec un champ laser qui sont la méthode de Fatunla explicite et la méthode de Fatunla implicite et nous avons aussi introduit la méthode prédicteur-correcteur, appelée « méthode de Fatunla modifiée ».

Introduction générale

L'équation de Schrödinger joue un rôle fondamental en mécanique quantique par analogie à celle de Newton en mécanique classique car elle régit l'évolution spatiale et temporelle d'un système physique [SERAICHE, 2018, Cohen-Tannoudji et al., 1977].

Plusieurs physiciens théoriciens se sont penchés à trouver des solutions à l'équation de Schrödinger pour différents systèmes physiques [Schrödinger, 1926, SAIDI, 2017] à partir de plusieurs méthodes.

Pour étudier les interactions laser-atomes, on a besoin de résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps (ESDT) qui décrit la dynamique du système atome+champ [Brabec and Krausz, 2000, Wassaf, 2002] pour tenter de mieux comprendre l'influence du potentiel coulombien sur le mécanisme d'ionisation [Giraud, 2005].

La résolution de cette équation n'est généralement pas réalisable analytiquement. Elle requiert l'introduction d'approximations et est effectuée à l'aide des méthodes numériques [Nyengeri, 2009].

La résolution de l'équation de Schrödinger d'un atome en interaction avec un champ électrique dépendant du temps nécessite généralement des temps de calcul exorbitants, surtout lorsque l'atome contient plus d'un électron [NYENGERI, 2005].

De nombreux efforts ont été faits pour développer des méthodes numériques de résolution d'une telle équation, entre autres les *méthodes spectrales*. Dans ces dernières, on développe la partie radiale de la fonction d'onde totale du système sur une base de fonctions de carré sommable. Les coefficients dépendant du temps apparaissant dans ce développement sont propagés dans le temps [Chqondi, 2016].

Si les fonctions et l'algorithme de propagation sont correctement choisis, le volume total d'opérations peut être fortement réduit. Il importe de signaler que si l'intensité du champ devient importante et/ou si le système atomique devient complexe, les approches purement numériques qui se fondent sur l'utilisation de grilles (différences finies, éléments finis) deviennent très lourdes numériquement, voire même impossibles à implémenter, à cause des limitations imposées par l'outil informatique. D'où la nécessité de développer des méthodes adaptées à ce genre de problème.

Les méthodes spectrales sont des méthodes globales par opposition aux méthodes de grilles qui elles sont locales. Elles présentent l'avantage de converger, en général, très rapidement(exponentiellement) vers la solution exacte, et ce en fonction de la taille de la base.

Par convergence exponentielle, nous entendons le fait que la variation, en fonction de la dimension N de la base, de la valeur absolue de l'erreur entre la valeur exacte de la fonction d'onde radiale et la valeur approchée de cette dernière peut être décrite, de manière approximative, par une fonction de type $Cexp(-pN)$ où C et $p > 0$ sont des paramètres réels à calculer numériquement(avec la fonction fit des logiciels gnuplot et maple par exemple) et $N = n_0, n_0 + 1, ..., n_{max}$ avec $n_0 > 1$. Mathématiquement, cela se traduit par l'une ou l'autre des expressions suivantes :

$$\mid \Psi_N(r) - \Psi(r) \mid \approx Cexp(-pN) \tag{1}$$

pour r donné,

$$\max_{r\in[r_i,r_f]} |\Psi_N(r) - \Psi(r)| \approx Cexp(-pN) \tag{2}$$

où la fonction $\Psi_N(r)$ est définie par :

$$\Psi_N(r) = \sum_{n=1}^{N} C_n S_n(r), \tag{3}$$

les $S_n(r)$ représentant les fonctions sturmiennes.

Sur le plan numérique, la taille de la base pose souvent un problème en rapport avec la quantité de mémoire exigée. En effet, la matrice associée à l'opérateur hamiltonien est en général pleine, sauf dans le cas particulier de l'atome d'hydrogène, ce qui forge l'introduction des méthodes sophistiquées pour résoudre l'ESDT [NYENGERI, 2005]. Une de ces méthodes est la rotation complexe du Hamiltonien [Balslev and Combes, 1971] [Reed and Simon, 1978, Reinhardt, 1982, Huens, 1996, Ben-Tal et al., 1993].

Dans notre travail, nous nous intéressons plus particulièrement à la résolution de l'ESDT pour un atome d'hydrogène. L'utilisation des fonctions réelles de carré sommable dans l'approximation de la fonction d'onde totale du système $\Psi(\vec{r}, t)$ exige une base de dimension énorme. En effet, étant donné que ces fonctions ont une extension finie, elles ne représentent le système que dans une région limitée de l'espace. Tant que le système reste dans cette région, la base est adéquate. Dès que l'un ou l'autre fragment du système quitte la région en question, la base cesse d'être adéquate.

Il faut aussi signaler que la propagation dans le temps de la fonction d'onde du système peut difficilement se faire dans la base des fonctions de carré sommable car le problème devient « raide », c'est-à-dire que le pas d'intégration sur le temps diminue beaucoup

quand on augmente la taille de la base. Pour résoudre ce problème de « raideur », on peut faire appel à des méthodes implicites, ce qui nécessite la résolution des gros systèmes d'équations algébriques à chaque pas d'intégration sur le temps.

Une autre manière d'éviter le problème de « raideur » tout en travaillant dans la base des fonctions de carré sommable est l'utilisation de la méthode de Fatunla [Fatunla, 1980, Fatunla, 1978].

Notre travail est composé de trois chapitres, une conclusion générale et trois annexes. Le premier chapitre porte sur les fonctions sturmiennes. Ces fonctions présentent un intérêt particulier dans la mesure où elles sont solutions d'une équation aux valeurs propres semblable à l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène. Dans le deuxième chapitre, nous résolvons l'équation de Schrödinger en l'absence du champ en utilisant la méthode spectrale de Galerkin qui consistant au développement de la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène sur une base finie complète de fonctions sturmiennes coulombiennes. Dans le troisième chapitre nous présentons deux méthodes utilisées pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps (ESDT) pour l'atome d'hydrogène en interaction avec un champ laser qui sont la méthode de Fatunla explicite et la méthode de Fatunla implicite et nous avons aussi introduit la méthode prédicteur-correcteur, appelée « méthode de Fatunla modifiée ».

Chapitre 1

Les fonctions sturmiennes

1.1 Introduction

La raison de l'étude des fonctions sturmiennes et leurs propriétés est que ces fonctions forment une base particulière bien adaptée au problème de l'hydrogène en champ extérieur.

Bien que les fonctions propres de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène forment une base complète, le développement sur cette base de la fonction d'onde décrivant l'atome d'hydrogène exposé à un champ laser conduit à des équations dont la résolution est difficile. Ceci provient du fait que le spectre du hamiltonien atomique possède une partie purement continue. L'utilisation d'une base de fonctions sturmiennes permet d'éviter ce problème. En fait le terme « sturmien » n'a pas d'autre signification historique que celle de rappeler que ces fonctions sont solutions d'un problème de type Sturm-Liouville [Rotenberg, 1962]. Formant une base purement discrète, ces fonctions sont solutions d'une équation aux valeurs propres semblable à celle de Schrödinger pour l'hydrogène.

Les matrices associées au hamiltonien de l'atome d'hydrogène et au hamiltonien d'interaction dans la base sturmienne sont très creuses ; ce qui permet d'aborder des problèmes où le nombre d'états mis en jeu est très important.

1.2 Le problème de Sturm-Liouville

1.2.1 Définition

En mathématique, un grand nombre de fonctions orthogonales (telles que les polynômes de Legendre, les polynômes de Legendre associés, les fonctions de Bessel, . . .) proviennent des solutions d'une équation différentielle du second ordre de la forme suivante :

$$f(x)\frac{d^2u}{dx^2} + g(x)\frac{du}{dx} + [h(x) + \lambda]u(x) = 0 \tag{1.1}$$

sur un intervalle (a,b), satisfaisant les conditions aux frontières

$$k_1 u(a) + k_2 u'(a) = 0 \tag{1.2}$$

et

$$l_1 u(b) + l_2 u'(b) = 0 \tag{1.3}$$

λ est un paramètre et k_1, k_2, l_1 et l_2 sont des constantes réelles données ; les couples (k_1, k_2) et (l_1, l_2) sont différents du couple $(0, 0)$.
L'expression (a, b), lorsqu'elle se rapporte à un intervalle, désigne un intervalle ouvert, semi-ouvert ou fermé d'extrémités a et b, avec $a < b$.

En posant

$$\frac{g(x)}{f(x)} = \frac{1}{w(x)}\frac{dw}{dx}, \tag{1.4}$$

$$q(x) = \frac{h(x)}{f(x)}w(x) \tag{1.5}$$

et

$$p(x) = \frac{w(x)}{f(x)}, \tag{1.6}$$

on peut écrire l'équation (1.1) sous les formes suivantes :

$$\frac{d}{dx}\left[w(x)\frac{du}{dx}\right] + [q(x) + \lambda p(x)]u(x) = 0, \tag{1.7}$$

$$\mathbf{L}u + \lambda p(x)u = 0, \tag{1.8}$$

où L est l'opérateur différentiel défini par

$$\mathbf{L} = \frac{d}{dx}\left[w(x)\frac{d}{dx}\right] + q(x) \tag{1.9}$$

Une équation de la forme(1.7) est appelée équation de Sturm-Liouville. Si nous y ajoutons les conditions aux frontières (1.2) et(1.3), nous obtenons un problème de Sturm-Liouville [Courant and Hilbert, 2008].

1.2.2 Propriétés des solutions d'un problème de Sturm-Liouville

La résolution d'un problème de Sturm-Liouville régulier conduit à une infinité de fonctions propres, $u_n(x)$, associées à des valeurs propres λ_n. On peut démontrer les deux théorèmes suivants :

Théorème 1.1(Orthogonalité des fonctions propres) : *Si les fonctions p, q, w et $\frac{dw}{dx}$ dans l'équation de Sturm-Liouville sont réelles et continues dans l'intervalle (a,b), alors*

les fonctions propres $u_n(x)$ sont orthogonales sur cet intervalle par rapport à la fonction de poids $p(x)$. Autrement dit,

$$\int_a^b u_n(x)u_m(x)p(x)dx = 0 \quad \lambda_n \neq \lambda_m \tag{1.10}$$

Démonstration

Soit l'équation (1.7) avec les conditions aux limites $u(a) = u(b) = 0$ et une contrainte de normalisation

$$\int_a^b p(x)u(x)^2dx = 1 \tag{1.11}$$

Lorsque, pour des conditions aux limites données, cette équation admet des solutions u_n pour des valeurs λ_n données, u_n est appelée fonction propre et λ_n valeur propre.
Soient λ_m et λ_n deux valeurs propres, et u_m et u_n les fonctions propres associées. On a alors :

$$\left[\frac{d}{dx}w(x)\frac{d}{dx}\right]u_m(x) = -[q(x) + \lambda_m p(x)]u_m(x) = 0, \tag{1.12}$$

$$\left[\frac{d}{dx}w(x)\frac{d}{dx}\right]u_n(x) = -[q(x) + \lambda_n p(x)]u_n(x) = 0, \tag{1.13}$$

En multipliant l'équation (1.12) par $u_n(x)$ et l'équation (1.13) par $u_m(x)$ et en retranchant l'équation (1.13) dans l'équation (1.12), on obtient par intégration

$$\int_a^b \left(u_n(x)\left[w(x)u_m'(x)\right]' - u_m(x)\left[w(x)u_n'(x)\right]'\right)dx = (\lambda_n - \lambda_m)\int_a^b p(x)u_m(x)u_n(x)dx \tag{1.14}$$

Après intégration par parties, en utilisant les conditions aux limites pour éliminer les termes tous intégrés, on obtient

$$(\lambda_n - \lambda_m)\int_a^b p(x)u_m(x)u_n(x)dx = 0 \tag{1.15}$$

D'où on déduit :

Deux fonctions propres u_m et u_n correspondant à des valeurs propres différentes λ_m et λ_n sont orthogonales par rapport au produit scalaire de $L^2(\Re, [a, b])$.

$$\int_a^b p(x)u_m(x)u_n(x)dx = 0 \quad si\ \lambda_n \neq \lambda_m \tag{1.16}$$

Théorème 1.2 : *Si le problème de Sturm-Liouville satisfait aux conditions du théorème 1 et si $w(x)$ et $p(x)$ sont positifs dans l'intervalle (a,b), alors :*

1. *les valeurs propres sont réelles et non dégénérées. Elles forment une suite infinie dénombrable, non bornée vers le haut, dont la distribution est*
   $0 < \lambda_0 < \lambda_1 < \lambda_3 < \lambda_4 < ...$

2. *la fonction propre $u_n(x)$ possède n zéros dans l'intervalle (a,b).*

3. *l'ensemble $\{u_n(x) \mid a \leq x \leq b, n = 0, 2, 3, ...\}$ des fonctions propres forme une base orthogonale complète pour les fonctions $f(x) \in L^2((a,b), p(x)dx)$ continues par morceaux.Plus précisément, on a :*

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x), \tag{1.17}$$

avec

$$c_n = \frac{\int_a^b f(x)u_n(x)p(x)dx}{\int_a^b u_n(x)u_n(x)p(x)dx}, \tag{1.18}$$

si la fonction f est continue en x.

1.2.3 Les fonctions sturmiennes coulombiennes

Les fonctions sturmiennes coulombiennes $S^{\kappa}_{n,\ell}(r)$ forment une base particulièrement bien adaptée au problème de l'atome d'hydrogène en présence d'un champ extérieur. Dans la littérature, on rencontre plusieurs définitions de fonctions sturmiennes coulombiennes. Elles diffèrent soit par le comportement à l'origine (en r^{ℓ} ou $r^{\ell+1}$), soit par la normalisation choisie. Nous utiliserons dans ce qui suit la même définition que Pont et Shakeshaft [Pont et al., 1991]. Les fonctions Sturmiennes $S^{\kappa}_{n,\ell}(r)$ sont les solutions d'un problème aux valeurs propres de Sturm–Liouville de type :

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - \frac{\alpha}{r} + \frac{\kappa^2}{2}\right] S^{\kappa}_{n,\ell}(r) = 0, \tag{1.19}$$

avec les conditions suivantes :

$$S^{\kappa}_{n,\ell}(0) = 0, \quad S^{\kappa}_{n,\ell}(\infty) = 0 \tag{1.20}$$

κ est pour l'instant un paramètre réel positif et arbitraire, tandis que n et ℓ sont des entiers positifs tels que $n > \ell$, et α est une valeur propre qui vaut $n\kappa$. On remarque assez facilement que l'équation (1.19) décrit le mouvement radial d'un électron d'énergie $E = -\frac{\kappa^2}{2} = -\frac{\alpha^2}{2n^2}$ dans le champ d'un noyau de charge α.
L'équation (1.19) peut être réécrite sous la forme suivante :

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r}\frac{d}{dr} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - \frac{\alpha}{r} + \frac{k^2}{2}\right] \frac{S^{\kappa}_{n,\ell}(r)}{r} = 0, \tag{1.21}$$

Nous allons comparer cette équation avec l'équation aux valeurs propres définissant les fonctions radiales $R_{E,\ell}(r)$ d'un atome d'hydrogène. Les fonctions $R_{E,\ell}(r)$ satisfont l'équa-

tion [Zettili, 2003]

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r}\frac{d}{dr} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - \frac{1}{r} - E\right] R_{E,\ell}(r) = 0, \tag{1.22}$$

dans le système d'unités atomiques. Dans cette dernière, le couplage (terme en $\frac{1}{r}$) est fixé et l'énergie E est valeur propre. Nous remarquons aussi que l'opérateur intervenant dans cette équation est auto-adjoint et non-borné ; le spectre est constitué de valeurs propres négatives d'expressions

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}, \quad n = 1, 2, 3, ... \tag{1.23}$$

et de valeurs propres positives qui forment un continuum. Par contre, dans l'équation (1.21) définissant les fonctions sturmiennes, le terme qui par analogie avec (1.22) joue le rôle de l'énergie $\frac{\kappa^2}{2}$ est fixé, et le paramètre de couplage α devient la valeur propre. Les fonctions sturmiennes coulombiennes sont de carrés sommables et forment une base complète de l'espace de Hilbert $L^2([0,\infty[;dr)$. Le développement de la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène exposé à un champ électrique extérieur, $\Psi(\vec{r},t)$, sur la base $\{S^{\kappa}_{n,\ell}\}$, conduit par conséquent à une expression du type :

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_{n,\ell,m} a_{n,\ell,m}(t)\frac{S^{\kappa}_{n,\ell}}{r}Y_{\ell,m}(\widehat{r}) \tag{1.24}$$

où les $Y_{\ell,m}$ sont des harmoniques sphériques. Dans cette expression, un facteur $\frac{1}{r}$ a été introduit pour que $\Psi(\vec{r},t)$ ait un comportement à l'origine en r^{ℓ} . Nous faisons intervenir une somme discrète sur les différents éléments de la base.

Si nous développons la même fonction $\Psi(\vec{r},t)$ sur les états propres de l'atome d'hydrogène, nous obtenons :

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_{\ell,m}\left\{\sum_{n} b_{n,\ell,m}(t)R_{n,\ell}(r) + \int_0^{\infty} b_{E,t}(t)R_{E,\ell}(r)dr\right\}Y_{\ell,m}(\widehat{r}) \tag{1.25}$$

Cette expression contient une intégrale sur les fonctions du continuum qui est très difficile, voire même impossible à manipuler lorsque l'on souhaite résoudre numériquement l'équation de Schrödinger. L'utilisation des fonctions Sturmiennes nous permet donc d'éviter ce problème en "discrétisant" le continuum. Les fonctions sturmiennes $S^{\kappa}_{n,\ell}(r)$ satisfont la relation d'orthogonalité

$$\left\langle S^{\kappa}_{n,\ell}|\frac{1}{r}|S^{\kappa}_{n',\ell}\right\rangle \equiv \int_0^{\infty} S^{\kappa}_{n,\ell}(r)\frac{1}{r}S^{\kappa}_{n',\ell}(r)dr = 0 \ si \ \ n \neq n' \tag{1.26}$$

Nous choisissons de les normaliser de la manière suivante(choix de Shakeshaft) :

$$\left\langle S^{\kappa}_{n,\ell} \mid S^{\kappa}_{n,\ell} \right\rangle = 1 \tag{1.27}$$

En résolvant l'équation (1.19) et en tenant compte des relations (1.26) et (1.27), nous obtenons :

$$S^{\kappa}_{n,\ell}(r) = N^{\kappa}_{n,\ell} r^{\ell+1} e^{-\kappa r} {}_1F_1(-n+\ell+1; 2\ell+2; 2\kappa r) \tag{1.28}$$

où le facteur de normalisation $N^{\kappa}_{n,\ell}$ est donné par

$$N^{\kappa}_{n,\ell} = \sqrt{\frac{\kappa}{n}} (2\kappa)^{\ell+1} \frac{1}{(2\ell+1)!} \left[\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \tag{1.29}$$

et où ${}_1F_1$ est une fonction hypergéométrique confluente. Ces fonctions sturmiennes peuvent aussi être exprimées en termes des polynômes de Laguerre $L^{\alpha}_n(x)$. En effet, en utilisant la relation donnée par l'expression [Abramowitz and Stegun, 1970]

$$L^{\alpha}_n(x) = \frac{(n+\alpha)!}{n!\alpha!} {}_1F_1(-n; \alpha+1; x), \tag{1.30}$$

nous avons :

$${}_1F_1(-n+\ell+1; 2\ell+2; 2kr) = \frac{(n-\ell-1)!(2\ell+1)!}{(n+\ell)!} L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(2kr) \tag{1.31}$$

En combinant (1.28), (1.29) et(1.31), nous obtenons :

$$S^{k}_{n,\ell}(r) = \tilde{N}^{k}_{n,\ell} r^{\ell+1} e^{-kr} L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(2kr), \tag{1.32}$$

avec

$$\tilde{N}^{k}_{n,\ell} = N^{k}_{n,\ell} \frac{(n-\ell-1)!(2\ell+1)!}{(n+\ell)!} = \sqrt{\frac{k}{n}} (2k)^{\ell+1} \left[\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \tag{1.33}$$

Pour toute valeur réelle positive du paramètre k, l'ensemble $\{S^{k}_{n,\ell}(r);\ n = \ell+1, \ell+2, ...\}$ forme une base complète de l'espace de Hilbert $L^2([0,\infty[; dr)$. Cette base est orthogonale par rapport à un produit scalaire inhabituel où l'on fait intervenir un facteur additionnel $\frac{1}{r}$ [Delande et al., 1991]. Les relations d'orthogonalité et de fermeture sont données par les expressions suivantes :

$$\left\langle S^{k}_{n',\ell} | \frac{1}{r} | S_{n,\ell^k} \right\rangle = \frac{k}{n} \delta_{n'n} \tag{1.34}$$

et

$$\sum_{n=\ell+1}^{\infty} \frac{n}{k} |S^{k}_{n,\ell}\rangle \langle S^{k}_{n,\ell}| \frac{1}{r} = \mathbb{1} \tag{1.35}$$

Suite à la non-orthogonalité de la base des fonctions Sturmiennes (par rapport au produit scalaire habituel), l'équation de Schrödinger, lorsqu'elle est écrite dans cette base,

ne conduit pas au problème aux valeurs propres habituel, mais plutôt à un problème beaucoup plus général du type

$$(\mathbf{A} - E_i\mathbf{B})\mathbf{v}_i = 0 \tag{1.36}$$

où $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ sont deux matrices carrées d'éléments connus, E_i et $\mathbf{v}_i$ sont les valeur et vecteur propres généralisés.

Pour avoir une idée de la convergence de la relation (1.35), nous considérons l'expression

$$I \equiv \langle f|f\rangle = \int_0^\infty f^*(r)f(r)dr \tag{1.37}$$

avec

$$f(r) = e^{-\alpha r} \tag{1.38}$$

Par intégration directe, nous trouvons :

$$\langle f|f\rangle = I = \int_0^\infty e^{-\alpha r}dr = 1 \tag{1.39}$$

En insérant la relation de fermeture (1.35) dans le membre de gauche de (1.39) et en prenant $\ell = 0$ par exemple, nous obtenons :

$$\sum_{n=1}^{N} \left\langle f|\frac{n}{\kappa}|S^\kappa_{n,0}\right\rangle \left\langle S^\kappa_{n,0}|\frac{1}{r}|f\right\rangle \equiv J \tag{1.40}$$

Pour obtenir cette relation, nous avons tronqué la somme intervenant dans la relation de fermeture (1.35) en considérant seulement les N premières fonctions Sturmiennes. Le nombre N doit être suffisamment grand pour qu'il y ait convergence. Compte tenu de l'expression (1.28) pour les fonctions sturmiennes, et de la relation (1.38) pour la fonction f, l'équation (1.40) donne :

$$\begin{aligned} J =& 4\kappa^2 \sum_{n=1}^{N} n \left[\int_0^\infty e^{-(1/2+\kappa)r} r\,{}_1F_1(-n+1,2,2\kappa r)dr\right] \times \left[\int_0^\infty e^{-(1/2+\kappa)r}\,{}_1F_1(-n+1,2,2\kappa r)dr\right] \\ =& \sum_{n=1}^{N} J_n, \end{aligned} \tag{1.41}$$

avec

$$J_n = 4\kappa^2 n \left[\int_0^\infty e^{-(1/2+\kappa)r} r\,{}_1F_1(-n+1,2,2\kappa r)dr\right] \times \left[\int_0^\infty e^{-(1/2+\kappa)r}\,{}_1F_1(-n+1,2,2\kappa r)dr\right] \tag{1.42}$$

Donc

$$J = 4\kappa^2 \sum_{n=1}^{N} n(J_{1,n} \times J_{2,n}) \tag{1.43}$$

avec

$$J_{1,n} = \int_0^\infty e^{-(1/2+\kappa)r} r\,{}_1F_1(-n+1,2,2\kappa r)dr \tag{1.44}$$

$$J_{2,n} = \int_0^\infty e^{-(1/2+\kappa)r}\,{}_1F_1(-n+1,2,2\kappa r)dr \tag{1.45}$$

En utilisant les relations [Gradshteyn, 1994]

$$\int_0^\infty e^{-st}\, t^{b-1}\,{}_1F_1(a\,,\,c\,;\,kt)\,\mathrm{d}t = \Gamma(b)\, s^{-b}\,{}_2F_1(a\,,\,b\,,\,c\,;\,ks^{-1})\;;|s|>|k|\;, \tag{1.46}$$

$${}_2F_1(-n,\beta,\beta;-z) = (1+z)^n \tag{1.47}$$

$${}_2F_1(1-n,1,2;-zt^{-1}) = \frac{(t+z)^n - t^n}{nzt^{n-1}} \tag{1.48}$$

dans les expressions(1.44) et (1.45), nous obtenons :

$$J_{1,n} = (\lambda+\kappa)^{-2}\left[1-2\kappa(\lambda+\kappa)^{-1}\right]^{n-1} \tag{1.49}$$

$$J_{2,n} = \frac{(\lambda-\kappa)^n - (\lambda+\kappa)^n}{n(-2k)(\lambda+\kappa)^n} \tag{1.50}$$

En mettant les équations (1.49)et (1.50) dans l'équation (1.43), nous obtenons

$$J = 4k^2 \sum_{n=1}^{N} n(\lambda+\kappa)^{-2}\left[1-2\kappa(\lambda+\kappa)^{-1}\right]^{n-1} \frac{(\lambda-\kappa)^n - (\lambda+\kappa)^n}{n(-2k)(\lambda+\kappa)^n} \tag{1.51}$$

Nous avons fait le calcul de J et des $I_n = \sum_{i=1}^{n} J_i\,;\; n = 1,2,...,N\,;$ pour $N = 100$ et $\kappa = 0.15$, $\lambda = 0.4$. Les résultats obtenus sont contenus dans le tableau 1.1. Nous remarquons qu'à partir de $n = 72$, $J = I_n = 1,25 = I$. La relation de fermeture (1.35) est donc vérifiée.

Notons que si nous remplaçons la fonction $f(r)$ (relation 1.38) par une fonction d'onde du continuum, nous devons aboutir à une somme divergente. La raison est que les fonctions sturmiennes ont une extension spatiale finie. Dans ce cas, il est nécessaire d'utiliser les approximants de Padé pour accélérer la convergence.

TABLEAU 1.1 – Vérification de la relation de fermeture pour les fonctions sturmiennes réelles

n	I_n	n	I_n
1	0.54094665664913598797896 32E+00	41	0.12499999999999983392380091E+01
2	0.89859733873120936846092 23E+00	42	0.12499999999999992451081859E+01
3	0.10842579459070790726883 86E+01	43	0.12499999999999996568673572E+01
4	0.11734202291937103027108 67E+01	44	0.12499999999999998440306169E+01
5	0.12149343038708340963933 24E+01	45	0.12499999999999999291048259E+01
6	0.12340080080819836341001 26E+01	46	0.12499999999999999677749209E+01
7	0.12427199542661843245371 49E+01	47	0.12499999999999999853522368E+01
8	0.12466886241502586411195 91E+01	48	0.12499999999999999933419258E+01
9	0.12484943613590943378047 30E+01	49	0.12499999999999999969736026E+01
10	0.12493155221466721916816 03E+01	50	0.12499999999999999986243648E+01
11	0.12496888537334220409122 61E+01	51	0.12499999999999999993747113E+01
12	0.12498585657528755612641 54E+01	52	0.12499999999999999997157779E+01
13	0.12499357108533829743038 49E+01	53	0.12499999999999999998708081E+01
14	0.12499707774844985516373 91E+01	54	0.12499999999999999999412764E+01
15	0.12499867170020179216024 97E+01	55	0.12499999999999999999733075E+01
16	0.12499939622661258092077 56E+01	56	0.12499999999999999999878670E+01
17	0.12499972555739582809184 92E+01	57	0.12499999999999999999944850E+01
18	0.12499987525332964395622 12E+01	58	0.12499999999999999999974932E+01
19	0.12499994329696138855747 07E+01	59	0.12499999999999999999988605E+01
20	0.12499997422589017012475 32E+01	60	0.12499999999999999999994821E+01
21	0.12499998828449524879045 76E+01	61	0.12499999999999999999997646E+01
22	0.12499999467477050914350 75E+01	62	0.12499999999999999999998930E+01
23	0.12499999757944112843537 15E+01	63	0.12499999999999999999999514E+01
24	0.12499999889974596497384 56E+01	64	0.12499999999999999999999779E+01
25	0.12499999949988452901770 30E+01	65	0.12499999999999999999999900E+01
26	0.12499999977267478581055 44E+01	66	0.12499999999999999999999954E+01
27	0.12499999989667035716459 43E+01	67	0.12499999999999999999999979E+01
28	0.12499999995303198052481 12E+01	68	0.12499999999999999999999991E+01
29	0.12499999997865090023761 05E+01	69	0.12499999999999999999999996E+01
30	0.12499999999029586374417 42E+01	70	0.12499999999999999999999998E+01
31	0.12499999999955890289745 845E+01	71	0.12499999999999999999999999E+01
32	0.12499999999979950131702 574E+01	72	0.12500000000000000000000000E+01
33	0.12499999999908864235011 53E+01	73	0.12500000000000000000000000E+01
34	0.12499999999958574652277 93E+01	74	0.12500000000000000000000000E+01
35	0.12499999999981170296489 96E+01	75	0.12500000000000000000000000E+01
36	0.12499999999991441043859 07E+01	76	0.12500000000000000000000000E+01
37	0.12499999999996109565390 49E+01	77	0.12500000000000000000000000E+01
38	0.12499999999998231620632 04E+01	78	0.12500000000000000000000000E+01
39	0.12499999999999196191196 38E+01	79	0.12500000000000000000000000E+01
40	0.12499999999999634632361 99E+01	80	0.12500000000000000000000000E+01

1.2.4 Les éléments de matrice

L'intérêt du choix d'une base de fonctions sturmiennes réside également dans la forme extrêmement simple des matrices associées aux opérateurs $\widehat{\mathbf{p}}^2$, $\widehat{\mathbf{p}}$ et $\frac{1}{r}$ [Yamani and Reinhardt, 1975, Rotenberg, 1970]. Nous signalons ici que :

- la matrice de recouvrement -élément de type $\langle S^k_{n,\ell}|S^k_{n',\ell}\rangle$- est tridiagonale, réelle et symétrique :

$$\langle S^k_{n,\ell}|S^k_{n-1,\ell}\rangle = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{(n+\ell)(n-\ell-1)}{n(n-1)}} \tag{1.52}$$

$$\langle S^k_{n,\ell}|S^k_{n,\ell}\rangle = 1 \tag{1.53}$$

$$\langle S^k_{n,\ell}|S^k_{n+1,\ell}\rangle = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{(n+\ell)(n-\ell-1)}{n(n+1)}} \tag{1.54}$$

  et vaut zéro dans les autres cas ;

- la matrice coulombienne-élément du type $\langle S^k_{n,\ell}|\frac{1}{r}|S^k_{n',\ell}\rangle$- est diagonale :

$$\langle S^k_{n,\ell}|\frac{1}{r}|S^k_{n,\ell}\rangle = \frac{k}{n}\delta_{n'n} \tag{1.55}$$

- l'élément de matrice $\langle S^k_{n,\ell}|\frac{1}{r^2}|S^k_{n',\ell}\rangle$ est donné par la relation :

$$\langle S^k_{n,\ell}|\frac{1}{r^2}|S^k_{n',\ell}\rangle = \frac{2k^2}{\sqrt{nn'}}\left(\frac{1}{2l+1}\right)\sqrt{\frac{\begin{pmatrix} n_< + \ell \\ 2\ell+1 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} n_> + \ell \\ 2\ell+1 \end{pmatrix}}} \tag{1.56}$$

  où $n_> = max(n, n')$ et $n_< = min(n, n')$

1.2.5 Les fonctions Sturmiennes complexes

Jusqu'à présent, nous avons considéré un κ réel. Il est utile, dans certaines situations, de le prendre complexe. Il suffit de remplacer le κ des fonctions Sturmiennes usuelles par $\kappa \exp(-i\theta)$, où θ est un paramètre réel. Nous appelons ce nouveau paramètre κ_c. Les fonctions Sturmiennes « complexes » sont alors :

$$S^{\kappa_c}_{n,\ell}(r) = N^{\kappa_c}_{n,\ell}\, r^{\ell+1} e^{-\kappa_c r}\, {}_1F_1(-n+\ell+1\,;\,2\ell+2\,;\,2\kappa_c r) \quad , \tag{1.57}$$

où le facteur de normalisation $N_{n,\ell}^{\kappa_c}$ est donné par :

$$N_{n,\ell}^{\kappa_c} = \sqrt{\frac{\kappa_c}{n}}(2\kappa_c)^{\ell+1}\frac{1}{(2\ell+1)!}\left[\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{1.58}$$

et

$$\kappa_c = \kappa\, \exp(-i\theta) \tag{1.59}$$

Nous verrons, dans le chapitre suivant, que le passage de κ à κ_c dans la définition des fonctions Sturmiennes équivaut à une dilatation complexe d'un angle θ de l'Hamiltonien du système considéré $\Big(r \longrightarrow r\exp(i\theta)\Big)$.

Pour utiliser correctement les fonctions Sturmiennes complexes, il faut faire très attention au choix du signe de la partie imaginaire de κ_c. Ce choix est en fait lié au comportement asymptotique de la fonction qu'on veut développer. Par exemple, si nous voulons développer une fonction d'onde sortante comme e^{ikr}, où $k \in \mathbb{R}^+$, en utilisant les fonctions $S_{n,0}^{\kappa}(r)$, nous devons choisir un κ_c dont la partie imaginaire est négative. Par contre, le développement de e^{-ikr} exige le choix d'un κ_c de partie imaginaire positive. Un mauvais choix du signe de $\Im(\kappa_c)$ conduit à un développement divergent. Pour prouver cela, considérons le développement suivant de la fonction e^{ikr} :

$$e^{ikr} = \sum_{n'} a_{n'}\frac{S_{n',0}^{\kappa_c}(r)}{r} \tag{1.60}$$

Pour avoir les coefficients $a_{n'}$, nous multiplions l'équation (1.60) par $S_{n,0}^{\kappa_c}(r)$ et nous intégrons sur $\mathbb{R}^+$. Nous obtenons :

$$\int_0^\infty S_{n,0}^{\kappa_c}(r)\, e^{ikr}\,\mathrm{d}r = \sum_{n'} a_{n'}\int_0^\infty S_{n,0}^{\kappa_c}(r)\,\frac{1}{r}\,S_{n',0}^{\kappa_c}(r)\,\mathrm{d}r = \frac{\kappa_c}{n}\,a_n\ , \tag{1.61}$$

d'où

$$a_n = \frac{n}{\kappa_c}\int_0^\infty S_{n,0}^{\kappa_c}(r)\, e^{ikr}\,\mathrm{d}r = 2n\sqrt{\kappa_c}\int_0^\infty e^{-sr}\, r\, {}_1F_1(-n+1\,,\,2\,;\,2\kappa_c r)\,\mathrm{d}r\ , \tag{1.62}$$

où $s = \kappa_c - ik$. En utilisant la relation [Gradshteyn, 1994]

$$\int_0^\infty e^{-st}\, t^{b-1}\, {}_1F_1(a\,,\,c\,;\,kt)\,\mathrm{d}t = \Gamma(b)\, s^{-b}\, {}_2F_1(a\,,\,b\,,\,c\,;\,ks^{-1})\ ;|s| > |k|\ , \tag{1.63}$$

nous obtenons, à partir de (1.62) :

$$a_n = 2n\sqrt{\kappa_c}\,\Gamma(2)\, s^{-2}\, {}_2F_1(-n+1\,,\,2\,,\,2\,;\,2\kappa_c s^{-1})\,, \tag{1.64}$$

où ${}_2F_1$ est une fonction hypergéométrique. Par ailleurs, nous avons [Gradshteyn, 1994] :

$$ {}_2F_1(-n\,,\,\beta\,,\,\beta\,;\,-z) = (1+z)^n \tag{1.65}$$

pour β arbitraire. D'où

$$ {}_2F_1(-n+1\,,\,2\,,\,2\,;\,2\kappa_c s^{-1}) = \left(1-2\kappa_c\, s^{-1}\right)^{n-1} \tag{1.66}$$

et donc

$$ a_n = \frac{2n\sqrt{\kappa_c}}{s^2}\left(1-\frac{2\kappa_c}{s}\right)^{n-1}\quad, \tag{1.67}$$

à condition que $|s| > |2\kappa_c|$. Finalement, nous avons :

$$ e^{ikr} = \sum_n t_n\,, \tag{1.68}$$

avec

$$ t_n = \frac{2n\sqrt{\kappa_c}}{s^2}\left(1-\frac{2\kappa_c}{s}\right)^{n-1}\,\frac{S^{\kappa_c}_{n,0}(r)}{r} \tag{1.69}$$

Le tableau 1.2 contient le résultat du calcul pour $k = 0.5$, $r = 4$, $\kappa_c = 0.3 - 0.15\,i$ et N_r (nombre total de Sturmiennes) = 50. Nous avons calculé les sommes partielles $T_n \equiv \sum_{m=1}^{n} t_m\,;\, n = 1\,,\,2\,,\,\ldots\,,\,N_r$. Nous voyons que T_n s'approche de plus en plus de $-0.41614683654714 + 0.90929742682568\,i$ qui est la valeur de e^{2i} obtenue par un calcul direct. Dans le tableau 1.3, nous avons le résultat du calcul lorsque $\kappa_c = 0.3 + 0.15\,i$ pour les mêmes valeurs de k, r et N_r. Cette fois–ci, le développement (1.68) diverge parce que le choix de la partie imaginaire de κ_c est mauvais. Il n'est pas possible d'obtenir la bonne valeur de e^{ikr} à partir de (1.68) en sommant directement sur les fonctions de base dans le cas où $\Im(\kappa_c) > 0$. Toutefois, il est possible d'avoir la convergence en utilisant la sommation de Padé au lieu de la sommation directe. Il suffit de considérer la suite $\left\{\!\left|T_n\right|\!\right\}$ des N_r sommes partielles obtenues à partir du membre de droite de (1.68) en sommant directement sur n termes de la somme, avec $n = 1,\,,\,2\,,\,\ldots\,,\,N_r$. Nous utilisons alors l'*algorithme epsilon de Wynn* [Weniger, 1985, Wynn, 1956, Wynn, 1966] (Voir annexe B) pour calculer les *approximants de Padé* [Baker and Graves-Morris, 1981, Bender and Orszag, 1999, Brezinski, 1978, Weniger, 1985] (Voir annexe A) diagonaux associés à la suite $\left\{\!\left|T_n\right|\!\right\}$. Le tableau 1.4 contient le resultat du calcul pour les mêmes valeurs de κ_c, k, r et N_r que précédemment. Nous remarquons que la suite $\left\{\!\left|\epsilon^{(0)}_{2n}\right|\!\right\}$ des approximants de Padé diagonaux converge vers la bonne valeur de e^{2i}.

TABLEAU 1.2 – $1^{ère}$ Colonne : nombre de Sturmiennes, $2^{ème}$ et $3^{ème}$ Colonnes : parties réelle et imaginaire de la valeur de e^{ikr} pour $k = 0.5$, $r = 4$, $\kappa_c = 0.3 - 0.15\,i$ et $N_r = 50$.

n	$\Re(T_n)$	$\Im(T_n)$
1	-.97771909590328D-01	0.24572635874404D+00
2	-.29260594796516D+00	0.33759278837075D+00
3	-.47826786113436D+00	0.48525283420668D+00
4	-.57522955588734D+00	0.64152626787720D+00
5	-.60982021287876D+00	0.78097558836069D+00
6	-.58901943692093D+00	0.89782790741477D+00
7	-.52764665022649D+00	0.97018378610077D+00
8	-.45841480712885D+00	0.99106511153015D+00
9	-.40693530227644D+00	0.97517638997673D+00
10	-.38234985132232D+00	0.94355370315021D+00
11	-.38165002791753D+00	0.91373185706134D+00
12	-.39491535763175D+00	0.89602462626465D+00
13	-.41072392384232D+00	0.89220590582198D+00
14	-.42126993425167D+00	0.89758785249346D+00
15	-.42441536861166D+00	0.90554490846584D+00
16	-.42226086637433D+00	0.91131020613197D+00
17	-.41832020623306D+00	0.91330083454731D+00
18	-.41529155820777D+00	0.91239989274300D+00
19	-.41418353673261D+00	0.91043491385267D+00
20	-.41460469388313D+00	0.90888542322005D+00
21	-.41559505778095D+00	0.90832231579748D+00
22	-.41636947903057D+00	0.90854491478329D+00
23	-.41663514394245D+00	0.90904731427757D+00
24	-.41650744926519D+00	0.90942625608796D+00
25	-.41625195601709D+00	0.90954274711543D+00
26	-.41607039226375D+00	0.90946673869695D+00
27	-.41602393105025D+00	0.90933705994893D+00
28	-.41606940670594D+00	0.90925222855224D+00
29	-.41613467869962D+00	0.90923646008883D+00
30	-.41617301970259D+00	0.90926325110153D+00
31	-.41617655922491D+00	0.90929558918771D+00
32	-.41616120017575D+00	0.90931215778134D+00
33	-.41614554276173D+00	0.90931156731753D+00
34	-.41613882073229D+00	0.90930304704466D+00
35	-.41614032094228D+00	0.90929569038671D+00
36	-.41614488247847D+00	0.90929321811385D+00
37	-.41614820867679D+00	0.90929454658110D+00
38	-.41614896359395D+00	0.90929689841915D+00
39	-.41614804091666D+00	0.90929832832818D+00
40	-.41614687675434D+00	0.90929845784777D+00
41	-.41614630372652D+00	0.90929789172006D+00
42	-.41614635994521D+00	0.90929734112806D+00
43	-.41614667922491D+00	0.90929713517892D+00
44	-.41614692609745D+00	0.90929721867006D+00
45	-.41614698615684D+00	0.90929738688391D+00
46	-.41614692102969D+00	0.90929749042891D+00
47	-.41614683775636D+00	0.90929749898608D+00
48	-.41614679816088D+00	0.90929745764032D+00
49	-.41614680393161D+00	0.90929741894540D+00
50	-.41614682726866D+00	0.90929740593440D+00

TABLEAU 1.3 – $1^{ère}$ Colonne : nombre de Sturmiennes, $2^{ème}$ et $3^{ème}$ Colonnes : parties réelle et imaginaire de la valeur de e^{ikr} pour $k = 0.5$, $r = 4$, $\kappa_c = 0.3 + 0.15\,i$ et $N_r = 50$.

n	$\Re(T_n)$	$\Im(T_n)$
1	-.29500795347146D+00	0.56549848267208D+00
2	0.40087784610925D+00	-.47641451687002D+00
3	-.29072300687683D+01	-.83796394232617D+00
4	-.13146923440296D+01	0.51770068871062D+01
5	0.79617780902370D+01	-.19914981258476D+01
6	-.11035628607640D+02	-.15580384304271D+02
7	-.30091407996481D+02	0.25220221504893D+02
8	0.48983460534615D+02	0.49687344327336D+02
9	0.75772797723497D+02	-.96613155053572D+02
10	-.19005789684719D+03	-.11803674201413D+03
11	-.19318561280876D+03	0.36095618752924D+03
12	0.66303013563257D+03	0.32812630351447D+03
13	0.57380195285060D+03	-.11882640457181D+04
14	-.20883041453964D+04	-.10252749348072D+04
15	-.18562057293038D+04	0.36173407682901D+04
16	0.62051305924681D+04	0.33984865984939D+04
17	0.63026584127586D+04	-.10552497662493D+05
18	-.17745869471707D+05	-.11819000492599D+05
19	-.22279718206669D+05	0.29396624503535D+05
20	0.47787767418108D+05	0.41938671814521D+05
21	0.78424084947638D+05	-.75947941634198D+05
22	-.11746108067412D+06	-.14521285612039D+06
23	-.26578549879733D+06	0.17557816517455D+06
24	0.25068639489150D+06	0.48045626024365D+06
25	0.85723752704743D+06	-.33424868174523D+06
26	-.39570352310051D+06	-.15084179638711D+07
27	-.26146258106419D+07	0.35605771469550D+06
28	0.37297527555285D+05	0.44575196498550D+07
29	0.74598527410620D+07	0.93071513372853D+06
30	0.32758629199003D+07	-.12225463118549D+08
31	-.19557886539890D+08	-.83694278332862D+07
32	-.18704043297927D+08	0.30407728343419D+08
33	0.45643565883642D+08	0.38667924147083D+08
34	0.75753394962659D+08	-.65439291027833D+08
35	-.87891877769515D+08	-.14235968867828D+09
36	-.25832574552697D+09	0.10618266159391D+09
37	0.10311093390538D+09	0.45418712341836D+09
38	0.77475481448239D+09	-.41085581876018D+08
39	0.15541650367879D+09	-.12817125849531D+10
40	-.20520889356136D+10	-.62936218195268D+09
41	-.16387974260523D+10	0.31659589481046D+10
42	0.46704302808527D+10	0.36303285628870D+10
43	0.73464970266143D+10	-.64961629615782D+10
44	-.82849974680406D+10	-.13971770467387D+11
45	-.25310115033856D+11	0.90597694490274D+10
46	0.66270757122317D+10	0.43958070497803D+11
47	0.73375474101911D+11	0.34509003669902D+10
48	0.29545028565681D+11	-.11763593601394D+12
49	-.18042093097996D+12	-.86599352669585D+11
50	-.20003147650968D+12	0.26244633709384D+12

TABLEAU 1.4 – $1^{ère}$ Colonne : nombre de Sturmiennes, $2^{ème}$ et $3^{ème}$ Colonnes : parties réelle et imaginaire de de la valeur de e^{ikr} obtenue en utilisant les approximants de Padé pour $k = 0.5$, $r = 4$, $\kappa_c = 0.3 + 0.15\,i$ et $N_r = 50$.

n	$\Re(\epsilon_{2n}^{(0)})$	$\Im(\epsilon_{2n}^{(0)})$
1	-.29500795347146D+00	0.56549848267208D+00
2	0.40087784610925D+00	-.47641451687002D+00
3	-.38116240059550D+00	0.18869437739076D+00
4	-.65427155123265D+00	0.40838573007899D+00
5	-.72690584193823D+00	0.43859392980844D+00
6	-.64893284068137D+00	0.39981455212102D+00
7	-.32950365368560D+00	0.84763731367506D+00
8	-.40148450295418D+00	0.91058915817972D+00
9	-.36041306013414D+00	0.89654931887090D+00
10	-.39079837522238D+00	0.88328707336788D+00
11	-.41635432436606D+00	0.90720504684782D+00
12	-.41970464250176D+00	0.90778555678748D+00
13	-.41618142095230D+00	0.90928209241792D+00
14	-.41619595694741D+00	0.90933562598209D+00
15	-.41614725644744D+00	0.90929770012603D+00
16	-.41614675551193D+00	0.90929823316404D+00
17	-.41614683671592D+00	0.90929743186005D+00
18	-.41614682963107D+00	0.90929743066450D+00
19	-.41614683671763D+00	0.90929742701077D+00
20	-.41614683662475D+00	0.90929742636718D+00
21	-.41614683645061D+00	0.90929742680562D+00
22	-.41614683648345D+00	0.90929742670174D+00
23	-.41614683652664D+00	0.90929742679676D+00
24	-.41614683647406D+00	0.90929742681089D+00
25	-.41614683647838D+00	0.90929742680664D+00
26	-.41614683647408D+00	0.90929742681082D+00
27	-.41614683653257D+00	0.90929742682113D+00
28	-.41614683655697D+00	0.90929742684788D+00
29	-.41614683655378D+00	0.90929742682683D+00
30	-.41614683655605D+00	0.90929742682843D+00
31	-.41614683655405D+00	0.90929742682718D+00
32	-.41614683656309D+00	0.90929742683591D+00
33	-.41614683654799D+00	0.90929742682556D+00
34	-.41614683654094D+00	0.90929742683046D+00
35	-.41614683654376D+00	0.90929742682874D+00
36	-.41614683654133D+00	0.90929742683110D+00
37	-.41614683654803D+00	0.90929742682736D+00
38	-.41614683655313D+00	0.90929742682854D+00
39	-.41614683654952D+00	0.90929742682488D+00
40	-.41614683653965D+00	0.90929742682355D+00
41	-.41614683654778D+00	0.90929742682032D+00
42	-.41614683654134D+00	0.90929742682067D+00
43	-.41614683654570D+00	0.90929742682357D+00
44	-.41614683655103D+00	0.90929742681883D+00
45	-.41614683654996D+00	0.90929742682544D+00
46	-.41614683654828D+00	0.90929742682109D+00
47	-.41614683654661D+00	0.90929742682448D+00
48	-.41614683654655D+00	0.90929742682530D+00
49	-.41614683654642D+00	0.90929742682410D+00
50	-.41614683654582D+00	0.90929742682205D+00

La figure 1.1 montre la variation, en fonction de la dimension de la base, de la valeur absolue de l'erreur entre $f_n(r)$ et e^{ikr}. Cette figure met en évidence la propriété de convergence exponentielle de la méthode spectrale de Galerkin.

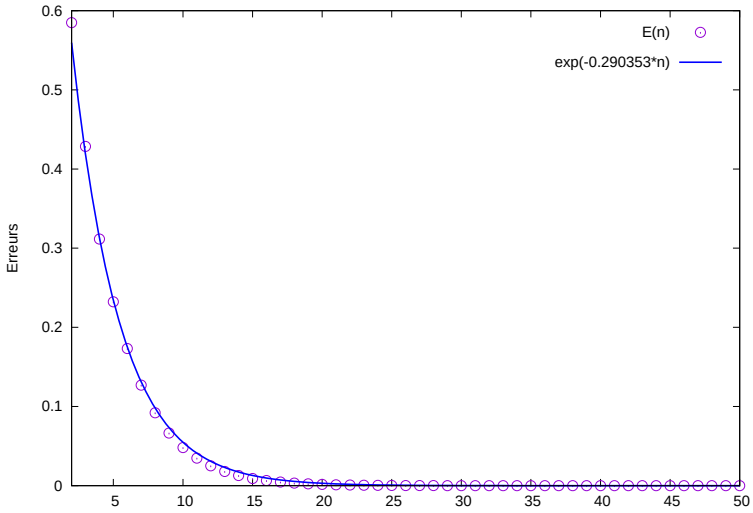


FIGURE 1.1 – Variation de $|f_n(r) - e^{ikr}|$ en fonction de n dans le cas particulier où $k = 0.5$ et $\kappa = \mid \kappa \mid e^{i\theta}$ avec $\mid \kappa \mid = 0.33$, $\theta = 0.75rad$, $n = 2, 3, ..., 50$ et $r = 0.4$

Pour la figure 1.2, nous étudions la variation de $E(n) \equiv \max_{r\in[r_i,r_f]} |f_n(r) - e^{ikr}|$ dans le cas où $n_{max} = 75$, $k = 0.65$, $n = 4, 5, ..., n_{max}$, $\mid \kappa \mid = 0.33$ et $\theta = 0.75rad$, $r_i = 0$, $r_f = 5$ et$\Delta_r = 0.001$. Cette figure aussi met en évidence la propriété de convergence exponentielle de la méthode spectrale de Galerkin.

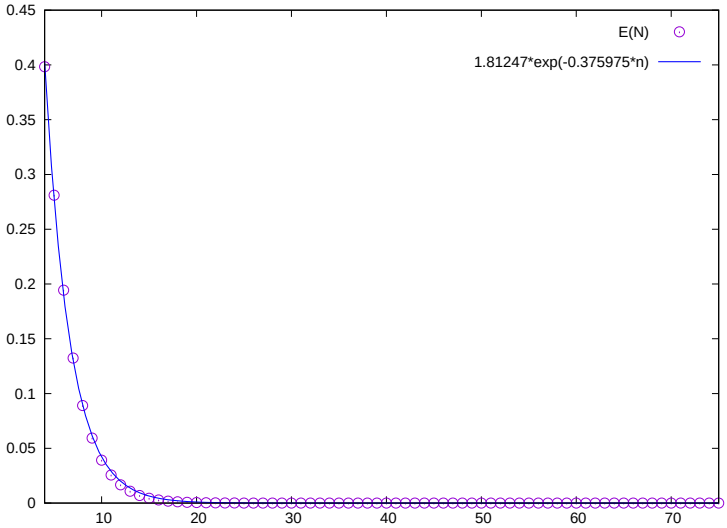


FIGURE 1.2 – Variation de $\max_{r\in[r_i,r_f]} |f_n(r) - e^{ikr}|$ en fonction de n

Nous constatons que la relation d'erreur est approximativement donnée par :

$$E(n) \approx ce^{-pn} \tag{1.70}$$

avec $c = 1.81247$ et $p = 0.375975$

1.2.6 Comportement des sturmiennes

On analyse le comportement qualitatif des fonctions sturmiennes pour divers paramètres κ et indices.
La figure 1.3 montre le tracé des fonctions sturmiennes pour $\kappa = 0.5$, $\ell = 2$ et trois valeurs de n ($n = 3$, $n = 5$ et $n = 10$). A partir de cette figure, nous constatons que l'amplitude des sturmiennes diminue lorsque n croît. Par contre, le nombre de nœuds ainsi que l'extension spatiale de ces fonctions augmentent avec n. Ainsi, si nous voulons reproduire une fonction étendue ou qui oscille rapidement, nous devons utiliser des fonctions sturmiennes d'indice n élevé.

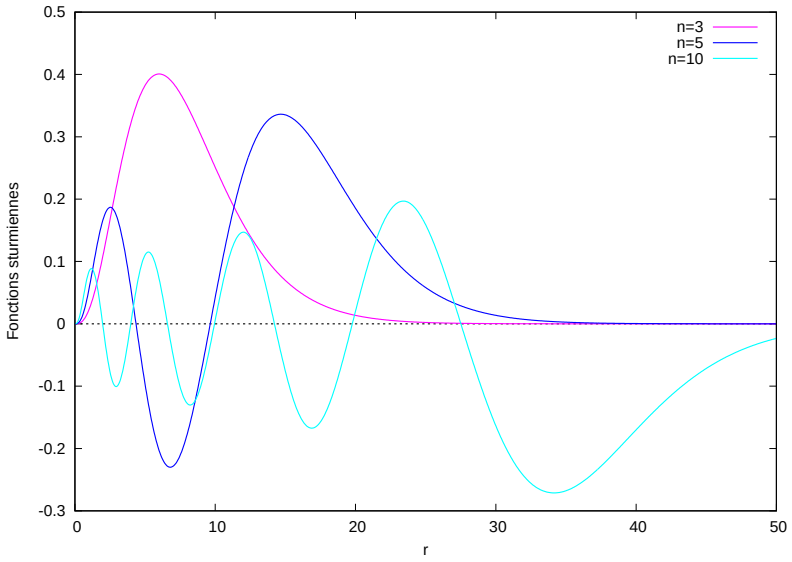


FIGURE 1.3 – Comportement des fonctions sturmiennes lorsque l'indice n varie avec κ et l fixés.

Sur la figure 1.4 nous représentons les courbes de $S_n^\ell(r)$ pour trois valeurs du paramètre non linéaire $\kappa(\kappa = 0.3,\ \kappa = 0.4$ et $\kappa = 0.5)$; $n = 5$ et $\ell = 0$. Nous remarquons que la fonction sturmienne s'étend beaucoup plus dans l'espace et diminue d'amplitude lorsque κ diminue. Par contre, le graphe de cette fonction est comprimé lorsque κ augmente. En conséquence, il faut des sturmiennes de paramètre κ petit pour reproduire une fonction spatialement étendue et un κ grand pour les fonctions oscillant rapidement.

Signalons que la période des oscillations augmente avec r pour les paramètres κ et n donnés.

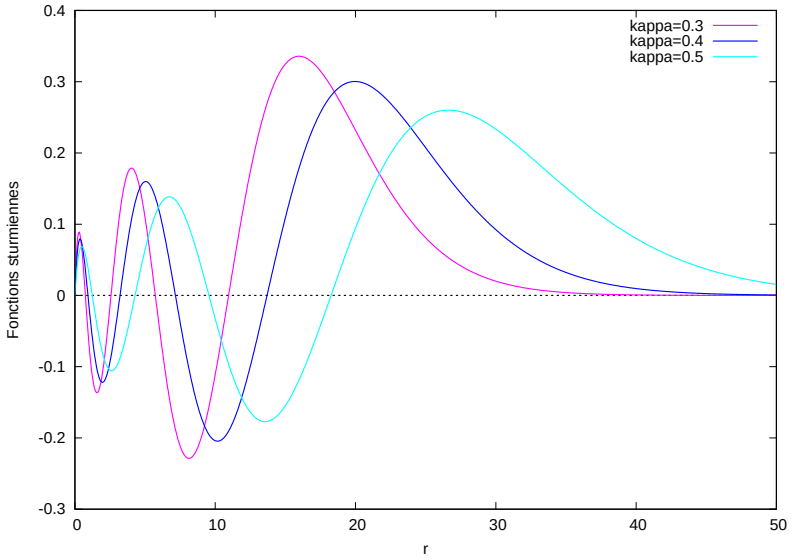


FIGURE 1.4 – Comportement des fonctions sturmiennes lorsque l'indice κ varie avec n et l fixés.

Chapitre 2

Résolution de l'équation de Schrödinger pour un atome d'hydrogène en l'absence du champ laser : utilisation de la méthode spectrale de Galerkin

2.1 Introduction

L'équation de Schrödinger est une équation fondamentale de la mécanique quantique, il s'agit d'une équation aux dérivées partielles qui décrit l'évolution au cours du temps de la fonction d'onde d'un système physique. L'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène sera écrite en faisant l'approximation que le noyau (dont la masse est 1836 fois celle de l'électron) constitue le centre de gravité du système où il est immobile, ce qui revient à négliger son énergie cinétique. L'énergie cinétique de l'atome se réduit donc à celle de l'électron ; il lui est associé l'opérateur

$$-\frac{h^2}{2\mu}\Delta_r \tag{2.1}$$

où μ désigne la masse réduite du système électron-noyau.

L'énergie potentielle de l'atome, de nature purement électrostatique, s'écrit en fonction de la distance r de l'électron au noyau :

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \tag{2.2}$$

L'équation de Schrödinger générale est de la forme :

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}_0(\vec{r})\psi(\vec{r},t) \tag{2.3}$$

où

$$\hat{H}_0(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \tag{2.4}$$

$\hat{H}_0(\vec{r})$ ne dépendant pas explicitement du temps, nous pouvons écrire :

$$\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})f(t). \tag{2.5}$$

L'équation de Schrödinger devient :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\psi(\vec{r})f(t)\right] = \hat{H}_0\left[\psi(\vec{r})f(t)\right] \tag{2.6}$$

où bien

$$i\hbar\psi(\vec{r})\frac{df(t)}{dt} = f(t)\hat{H}_0(\vec{r})\psi(\vec{r}) \tag{2.7}$$

En divisant chaque membre de cette équation par $\Psi(\vec{r})f(t)$, on obtient :

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = \frac{\hat{H}_0(\vec{r})\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} \tag{2.8}$$

Nous pouvons donc écrire :

$$\frac{\hat{H}_0(\vec{r})\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} = \text{cte} = E \tag{2.9}$$

ce qui donne l'équation aux valeurs propres

$$\hat{H}_0(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \tag{2.10}$$

Sachant que

$$\hat{H}_0(\vec{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}, \tag{2.11}$$

l'équation aux valeurs propres devient

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{2.12}$$

où

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \tag{2.13}$$

$\hat{L}$ étant donné par l'expression :

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \tag{2.14}$$

2.2 Les valeurs propres et les fonctions d'onde exactes de l'équation de Schrödinger

Les fonctions propres du hamiltonien dépendent de r, θ et ϕ.

Les opérateurs $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$ commutent, donc ils ont les mêmes fonctions propres.

La solution de l'équation de Schrödinger pour un atome d'hydrogène est obtenue sous la forme :

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \tag{2.15}$$

où $R_{n\ell}(r)$ est la partie radiale et $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ est la partie angulaire

La solution de l'équation de Schrödinger satisfait à :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{\vec{L}}^2 + V(r) \right] R_{n\ell}(r) y_{lm}(\theta, \varphi) = E R_{n\ell}(r) y_{\ell m}(\theta, \varphi) \tag{2.16}$$

Sachant que $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ est une fonction propre de $\hat{\vec{L}}^2$ de valeur propre $\ell(\ell+1)$; l'équation radiale satisfait :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} \left(r R_{n\ell}(r) \right) + \left[V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu^2} \right] \left(r R_{n\ell}(r) \right) = E_n \left(r R_{n\ell}(r) \right) \tag{2.17}$$

La solution de l'équation radiale décrit l'éloignement de l'électron par rapport au noyau. Elle est donnée par [Madroñero and Piraux, 2009] :

$$R_{n,\ell}(r) = \left[\left(\frac{2Z}{n a_\mu} \right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+1)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} \rho^\ell e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) \tag{2.18}$$

où

$$\rho = \frac{2Z}{n a_\mu} r, \tag{2.19}$$

$$a_\mu = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2}, \tag{2.20}$$

tandis que les $L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$ sont les polynômes de Laguerre associés qui sont donnés par la

relation [Bransden and Joachain, 2003] :

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n_r}(-1)^{k+1}\frac{[(n+\ell)!]^2}{(n_r-k)!(2\ell+1+k)!}\frac{\rho^k}{k!} \tag{2.21}$$

avec $n_r = n - \ell - 1$.

Les harmoniques sphériques quant à elles sont données par [Mitchel, 1978],[Herbst, 1996] :

$$Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = (-1)^m\sqrt{\frac{(2\ell+1)!(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}}P_{\ell m}(cos\theta)e^{im\phi} \tag{2.22}$$

Elles fournissent des informations sur la position de l'électron autour du noyau. Il importe de préciser que les $P_{\ell m}$ sont les polynômes de Legendre.

Les valeurs propres sont obtenues selon :

$$E_n = -\frac{\mu}{2\hbar}\left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right]^2\frac{1}{n^2} \tag{2.23}$$

En système d'unité atomique, les niveaux d'énergie sont donnés par :

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{1}{n^2} \tag{2.24}$$

Les expressions (2.25)–(2.39) donnent les fonctions d'onde radiales normalisées de l'atome d'hydrogène pour n variant de 1 à 5. Chacune de ces foncions contient le nombre quantique principal (n) et le nombre quantique orbital (ℓ). Le nombre quantique principal n représente le niveau d'énergie des orbitales de l'électron, tandis que le nombre quantique orbital (ℓ) détermine la forme de l'orbitale de l'électron. La valeur du nombre quantique principal autorisé est ($n = \ell + 1,\ \ell + 2,\ \ell + 3, \cdots$), tandis que la valeur du nombre quantique orbital autorisé est $\ell = 0, 1, 2, \cdots, n-1$) [Bransden and Joachain, 2003].

Il s'ensuit que lorsque n varie de 1 à 5, nous avons au total 15 fonctions d'onde radiales données par les expressions suivantes :

$$R_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) \tag{2.25}$$

$$R_{20}(r) = 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(1-\frac{Zr}{2a_0}\right)exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right) \tag{2.26}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right) \tag{2.27}$$

$$R_{30}(r) = 2\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left(1-\frac{2Zr}{3a_0}+\frac{2Z^2r^2}{27a_0^2}\right)exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right) \tag{2.28}$$

$$R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{9}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left(1-\frac{Zr}{6a_0}\right)\left(\frac{Zr}{a_0}\right)exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right) \tag{2.29}$$

$$R_{32}(r) = \frac{4}{27\sqrt{10}}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right) \tag{2.30}$$

$$R_{40}(r) = \frac{16}{(16a_0)^{3/2}}\left[1-12\left(\frac{r}{16a_0}\right)+32\left(\frac{r^2}{(16a_0)^2}\right)-\frac{64}{3}\left(\frac{r^3}{(16a_0)^3}\right)\right]exp\left(-\frac{4r}{16a_0}\right) \tag{2.31}$$

$$R_{41}(r) = \frac{64\sqrt{15}}{3(16a_0)^{3/2}}\left[\left(\frac{r}{16a_0}\right)-4\left(\frac{r^2}{(16a_0)^2}\right)+\frac{16}{5}\left(\frac{r^3}{(16a_0)^3}\right)\right]exp\left(-\frac{4r}{16a_0}\right) \tag{2.32}$$

$$R_{42}(r) = \frac{256\sqrt{5}}{15(16a_0)^{3/2}}\left[3\left(\frac{r^2}{(16a_0)^2}\right)-4\left(\frac{r^3}{(16a_0)^3}\right)\right]exp\left(-\frac{4r}{16a_0}\right) \tag{2.33}$$

$$R_{43}(r) = \frac{1024\sqrt{35}}{105(16a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^3}{(16a_0)^3}\right)exp\left(-\frac{4r}{16a_0}\right) \tag{2.34}$$

$$\begin{aligned}R_{50}(r) =& 10\sqrt{5}\left(\frac{Z}{25a_0}\right)^{3/2}\left[1-20\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)+100\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)^2-\frac{500}{3}\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)^3+\frac{250}{3}\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)^4\right]\\ &\times exp\left(-\frac{Zr}{5a_0}\right)\end{aligned} \tag{2.35}$$

$$\begin{aligned}R_{51}(r) =& \frac{50\sqrt{30}}{9}\left(\frac{Z}{25a_0}\right)^{3/2}\left[6\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)-45\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)^2+90\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)^3-50\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)^4\right]\times\\ &exp\left(-\frac{Zr}{5a_0}\right)\end{aligned} \tag{2.36}$$

$$R_{52}(r) = \frac{50\sqrt{70}}{21}\left(\frac{Z}{25a_0}\right)^{3/2}\left[21\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)^2-70\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)^3+50\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)^4\right]exp\left(-\frac{Zr}{5a_0}\right) \tag{2.37}$$

$$R_{53}(r) = \frac{250\sqrt{70}}{21}\left(\frac{Z}{25a_0}\right)^{3/2}\left[4\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)^3-5\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)^4\right]exp\left(-\frac{Zr}{5a_0}\right) \tag{2.38}$$

$$R_{54}(r) = \frac{1250\sqrt{70}}{63}\left(\frac{Z}{25a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{25a_0}\right)^4 exp\left(-\frac{Zr}{5a_0}\right) \tag{2.39}$$

2.3 Solutions numériques de l'équation de Schrödinger : la méthode spectrale de Galerkin

Pour résoudre numériquement l'équation de Schrödinger, nous allons employer la méthode spectrale de Galerkin qui consiste à développer la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène

sur une base finie complète de fonctions sturmiennes coulombiennes. Ces fonctions sont de carrée sommable et forment une base complète de l'espace de Hilbert. L'équation de Schrödinger à résoudre est dans le système d'unité atomique

$$H_0(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = \left[-\frac{1}{2}\Delta_r - \frac{1}{r}\right]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \tag{2.40}$$

En multipliant à gauche l'équation (2.40) par $S^k_{n\ell}(r)$, on obtient après intégration dans tout l'espace l'équation matricielle

$$\hat{\mathbf{H}}_0\mathbf{C} = E\mathbf{S}\mathbf{C} \tag{2.41}$$

où

- **S** est la matrice de recouvrement

- $\mathbf{H}_0$ est la matrice du hamiltonien non perturbé

- **C** est un vecteur d'état qui contient les coefficients $a_{n\ell}$

Il s'agit d'une équation aux valeurs propres généralisée pouvant être résolue au moyen des procédures de la librairie LAPACK.

2.4 Résultats des simulations numériques

2.4.1 Les énergies

Le tableau (2.1) montre les valeurs des énergies calculées analytiquement et numériquement lorsque $N = 40$ et $\ell = 0$. Nous remarquons que les premières énergies négatives coïncident exactement. Pour les états de N élevé, l'écart augmente.

Le tableau (2.2) contient les nonante premières énergies, obtenues analytiquement et numériquement, dans le cas où $N = 400,\ \ell = 10,\ \kappa = 0.025$. Il est aisé de remarquer que toutes ces énergies sont négatives. De plus, les valeurs numériques et celles exactes sont très proches pour toutes les nonante énergies considérées.

TABLEAU 2.1 – Colonne de gauche : les valeurs de n, colonne du milieu et colonne de droite : les énergies propres obtenues numériquement et analytiquement respectivement. $N = 40$,$\kappa = 0.2$ et $\ell = 0$.

n	E_{num}	E_{anal}
1	-0.499999999996034	-0.500000000000000
2	-0.124999999999999	-0.125000000000000
3	$-5.555555555555671E-002$	$-5.555555555555555E-002$
4	$-3.125000000000209E-002$	$-3.125000000000000E-002$
5	$-2.000000000000002E-002$	$-2.000000000000000E-002$
6	$-1.388888888888752E-002$	$-1.388888888888889E-002$
7	$-1.020408163265295E-002$	$-1.020408163265306E-002$
8	$-7.812499999999510E-003$	$-7.812500000000000E-003$
9	$-6.172839506171710E-003$	$-6.172839506172839E-003$
10	$-4.999999999999419E-003$	$-5.000000000000000E-003$
11	$-4.132231390844835E-003$	$-4.132231404958678E-003$
12	$-3.472206510729773E-003$	$-3.472222222222222E-003$
13	$-2.956493962178596E-003$	$-2.958579881656805E-003$
14	$-2.509177724548638E-003$	$-2.551020408163265E-003$
15	$-1.999664259150684E-003$	$-2.222222222222222E-003$
16	$-1.354382160721221E-003$	$-1.953125000000000E-003$
17	$-5.588827819917924E-004$	$-1.730103806228374E-003$
18	$3.996869884868766E-004$	$-1.543209876543210E-003$
19	$1.541659403407387E-003$	$-1.385041551246537E-003$
20	$2.895406122986042E-003$	$-1.250000000000000E-003$
21	$4.498599636643464E-003$	$-1.133786848072562E-003$
22	$6.400554752320525E-003$	$-1.033057851239669E-003$
23	$8.665834691757149E-003$	$-9.451795841209830E-004$
24	$1.137957879952870E-002$	$-8.680555555555555E-004$
25	$1.465536835959453E-002$	$-8.000000000000000E-004$
26	$1.864700309908707E-002$	$-7.396449704142012E-004$
27	$2.356650904829677E-002$	$-6.858710562414266E-004$
28	$2.971240242496575E-002$	$-6.377551020408163E-004$
29	$3.751543258116753E-002$	$-5.945303210463733E-004$
30	$4.761530787894198E-002$	$-5.555555555555556E-004$
31	$6.099488743908676E-002$	$-5.202913631633715E-004$
32	$7.922677838373388E-002$	$-4.882812500000000E-004$
33	0.104954197068173	$-4.591368227731864E-004$
34	0.142899183804630	$-4.325259515570934E-004$
35	0.202177448848088	$-4.081632653061225E-004$
36	0.302274383932071	$-3.858024691358024E-004$
37	0.491113208652926	$-3.652300949598247E-004$
38	0.913605361989461	$-3.462603878116343E-004$
39	2.18610685697211	$-3.287310979618672E-004$
40	9.70102125349184	$-3.125000000000000E-004$

TABLEAU 2.2: Colonne de gauche : nombre d'itération, colonne du milieu et colonne de droite : les énergies propres obtenues numériquement et analytiquement respectivement dans le cas où $N = 400$, $\ell = 10$ et $\kappa = 0.02$.

n	E_{num}	E_{anal}
1	-0.499999999988773	-0.500000000000000
2	-0.125000000000000	-0.125000000000000
3	-0.125000000000000	-0.125000000000000
4	-5.555555555555575E-002	-5.555555555555555E-002
5	-5.555555555555562E-002	-5.555555555555555E-002
6	-5.555555555555553E-002	-5.555555555555555E-002
7	-3.125000000000008E-002	-3.125000000000000E-002
8	-3.124999999999999E-002	-3.125000000000000E-002
9	-3.124999999999994E-002	-3.125000000000000E-002
10	-3.124999999999982E-002	-3.125000000000000E-002
11	-2.000000000000001E-002	-2.000000000000000E-002
12	-2.000000000000000E-002	-2.000000000000000E-002
13	-2.000000000000000E-002	-2.000000000000000E-002
14	-1.999999999999988E-002	-2.000000000000000E-002
15	-1.999999999999983E-002	-2.000000000000000E-002
16	-1.388888888888905E-002	-1.388888888888889E-002
17	-1.388888888888892E-002	-1.388888888888889E-002
18	-1.388888888888890E-002	-1.388888888888889E-002
19	-1.388888888888884E-002	-1.388888888888889E-002
20	-1.388888888888883E-002	-1.388888888888889E-002
21	-1.388888888888883E-002	-1.388888888888889E-002
22	-1.020408163265313E-002	-1.020408163265306E-002
23	-1.020408163265311E-002	-1.020408163265306E-002
24	-1.020408163265310E-002	-1.020408163265306E-002
25	-1.020408163265309E-002	-1.020408163265306E-002
26	-1.020408163265305E-002	-1.020408163265306E-002
27	-1.020408163265304E-002	-1.020408163265306E-002
28	-1.020408163265302E-002	-1.020408163265306E-002
29	-7.812500000000118E-003	-7.812500000000000E-003
30	-7.812500000000064E-003	-7.812500000000000E-003
31	-7.812500000000023E-003	-7.812500000000000E-003
32	-7.812500000000012E-003	-7.812500000000000E-003
33	-7.812500000000007E-003	-7.812500000000000E-003
34	-7.812500000000002E-003	-7.812500000000000E-003
35	-7.812500000000000E-003	-7.812500000000000E-003
36	-7.812499999999983E-003	-7.812500000000000E-003
37	-6.172839506172909E-003	-6.172839506172839E-003

(suite)

Tableau 2.2 – *(suite)*

n	E_{num}	E_{anal}
38	-6.172839506172895E-003	-6.172839506172839E-003
39	-6.172839506172894E-003	-6.172839506172839E-003
40	-6.172839506172885E-003	-6.172839506172839E-003
41	-6.172839506172875E-003	-6.172839506172839E-003
42	-6.172839506172858E-003	-6.172839506172839E-003
43	-6.172839506172857E-003	-6.172839506172839E-003
44	-6.172839506172850E-003	-6.172839506172839E-003
45	-6.172839506172839E-003	-6.172839506172839E-003
46	-5.000000000000051E-003	-5.000000000000000E-003
47	-5.000000000000045E-003	-5.000000000000000E-003
48	-5.000000000000032E-003	-5.000000000000000E-003
49	-5.000000000000031E-003	-5.000000000000000E-003
50	-5.000000000000026E-003	-5.000000000000000E-003
51	-5.000000000000013E-003	-5.000000000000000E-003
52	-5.000000000000012E-003	-5.000000000000000E-003
53	-5.000000000000009E-003	-5.000000000000000E-003
54	-5.000000000000004E-003	-5.000000000000000E-003
55	-4.999999999999987E-003	-5.000000000000000E-003
56	-4.132231404958785E-003	-4.132231404958678E-003
57	-4.132231404958730E-003	-4.132231404958678E-003
58	-4.132231404958687E-003	-4.132231404958678E-003
59	-4.132231404958686E-003	-4.132231404958678E-003
60	-4.132231404958671E-003	-4.132231404958678E-003
61	-4.132231404958671E-003	-4.132231404958678E-003
62	-4.132231404958669E-003	-4.132231404958678E-003
63	-4.132231404958669E-003	-4.132231404958678E-003
64	-4.132231404958650E-003	-4.132231404958678E-003
65	-4.132231404958650E-003	-4.132231404958678E-003
66	-3.472222222222302E-003	-3.472222222222222E-003
67	-3.472222222222246E-003	-3.472222222222222E-003
68	-3.472222222222243E-003	-3.472222222222222E-003
69	-3.472222222222238E-003	-3.472222222222222E-003
70	-3.472222222222226E-003	-3.472222222222222E-003
71	-3.472222222222225E-003	-3.472222222222222E-003
72	-3.472222222222223E-003	-3.472222222222222E-003
73	-3.472222222222216E-003	-3.472222222222222E-003
74	-3.472222222222214E-003	-3.472222222222222E-003
75	-3.472222222222209E-003	-3.472222222222222E-003
76	-2.958579881656852E-003	-2.958579881656805E-003
77	-2.958579881656831E-003	-2.958579881656805E-003

(suite)

Tableau 2.2 – *(suite)*

n	E_{num}	E_{anal}
78	-2.958579881656816E-003	-2.958579881656805E-003
79	-2.958579881656810E-003	-2.958579881656805E-003
80	-2.958579881656809E-003	-2.958579881656805E-003
81	-2.958579881656803E-003	-2.958579881656805E-003
82	-2.958579881656802E-003	-2.958579881656805E-003
83	-2.958579881656796E-003	-2.958579881656805E-003
84	-2.958579881656788E-003	-2.958579881656805E-003
85	-2.958579881656783E-003	-2.958579881656805E-003
86	-2.551020408163304E-003	-2.551020408163265E-003
87	-2.551020408163292E-003	-2.551020408163265E-003
88	-2.551020408163279E-003	-2.551020408163265E-003
89	-2.551020408163273E-003	-2.551020408163265E-003
90	-2.551020408163272E-003	-2.551020408163265E-003

2.4.2 Les fonctions d'ondes normalisées

Les figures (2.1) – (2.2) montrent les graphes de $R_{n\ell}(r)$ pour $n = 1$ à 5.

Pour chaque couple (n, ℓ) nous superposons le graphe obtenu à partir des résultats numériques (lignes discontinues) d'une part et de l'expression analytique (ligne continue) de l'autre part.

Pour le calcul numérique, nous avons pris $N = 400,\ L = 10$ et $\kappa = 0.025$. Nous remarquons que les résultats numériques et ceux exacts coïncident pour toutes les 15 fonctions d'onde considérées.

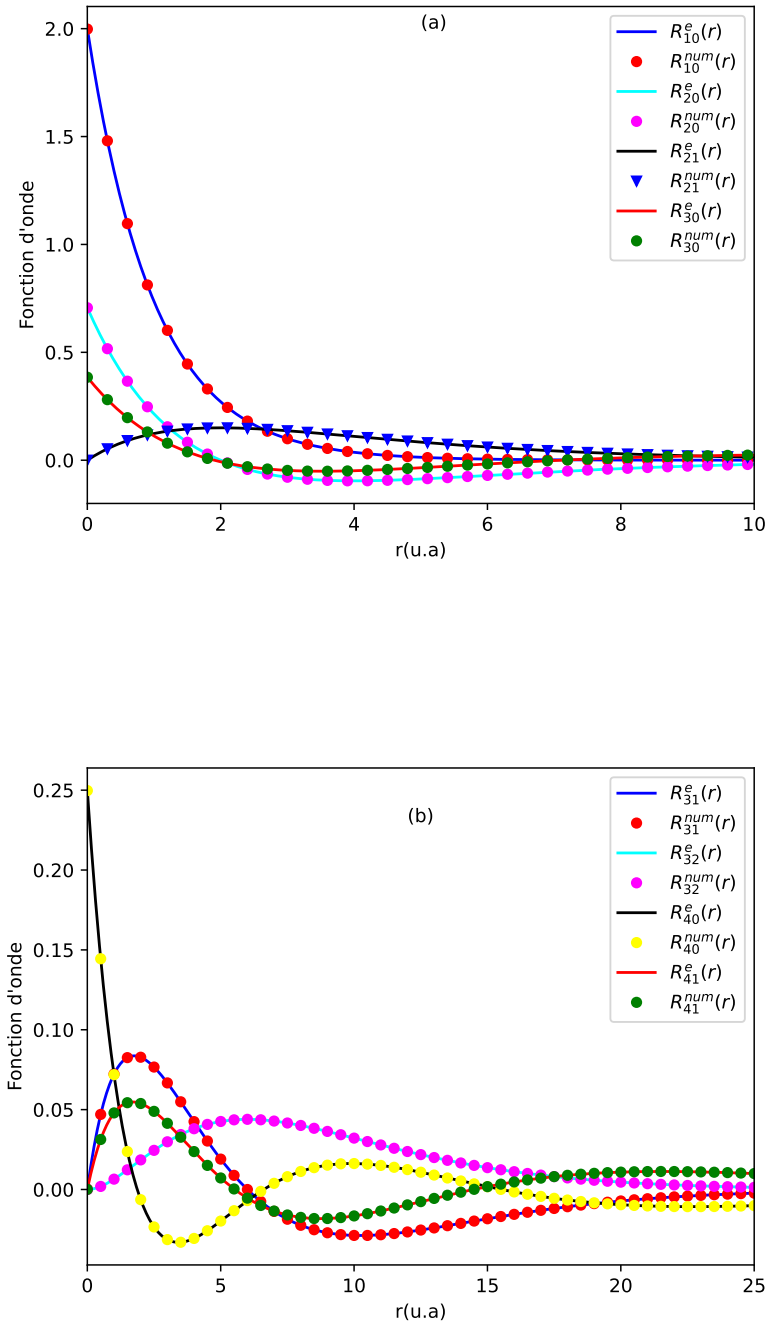


FIGURE 2.1 – Graphes $R^{num}_{10}(r)$, $R^e_{10}(r)$, $R^{num}_{20}(r)$, $R^e_{20}(r)$, $R^{num}_{21}(r)$, $R^e_{21}(r)$, $R^{num}_{30}(r)$, $R^e_{30}(r)$ en (a) ; $R^{num}_{31}(r)$, $R^e_{31}(r)$, $R^{num}_{32}(r)$, $R^e_{32}(r)$, $R^{num}_{40}(r)$, $R^e_{40}(r)$, $R^{num}_{41}(r)$, $R^e_{41}(r)$ en (b).

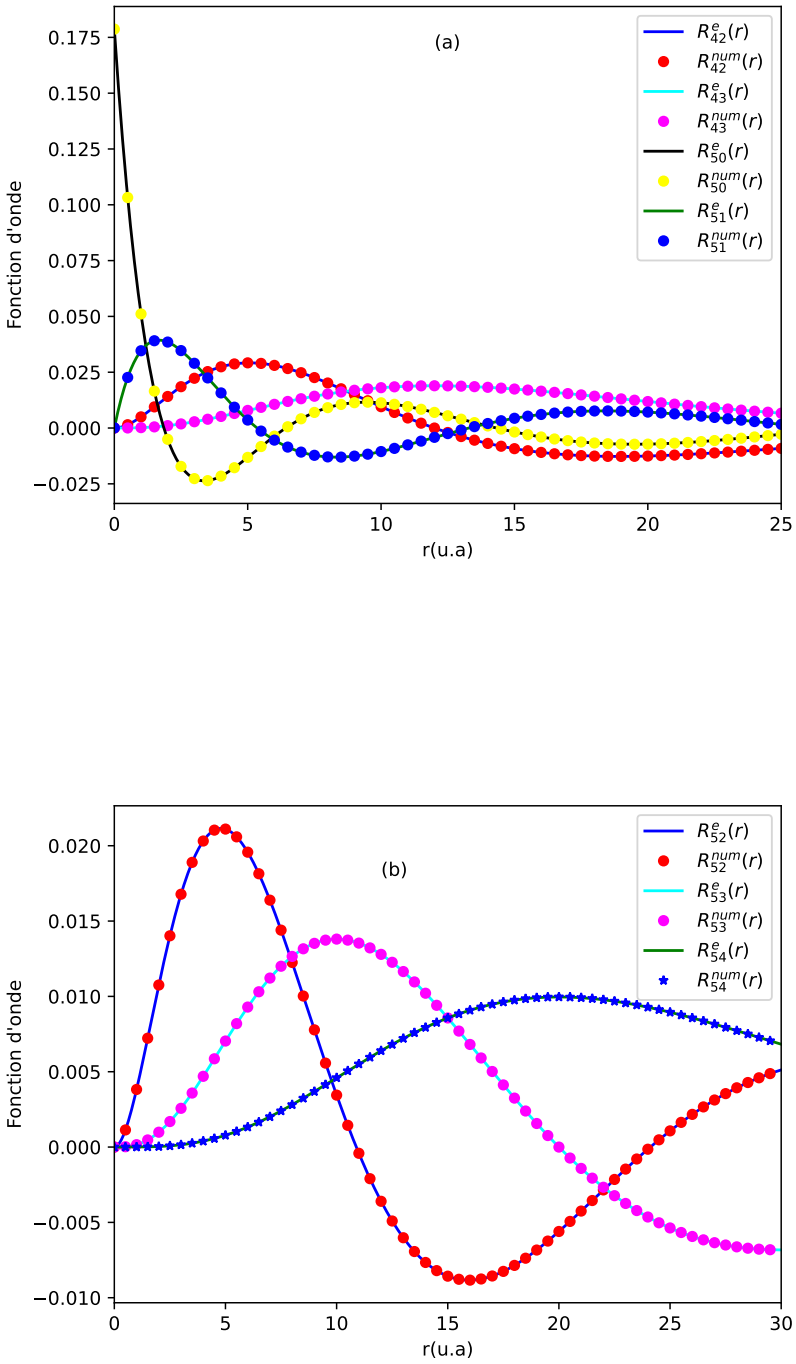


FIGURE 2.2 – Graphes $R^{num}_{42}(r)$, $R^e_{42}(r)$, $R^{num}_{43}(r)$, $R^e_{43}(r)$, $R^{num}_{50}(r)$, $R^e_{50}(r)$, $R^{num}_{51}(r)$, $R^e_{51}(r)$ en (a) ; $R^{num}_{52}(r)$, $R^e_{52}(r)$, $R^{num}_{53}(r)$, $R^e_{53}(r)$, $R^{num}_{54}(r)$, $R^e_{54}(r)$ en (b).

2.5 Spectre du hamiltonien atomique dilaté

La dilatation complexe du Hamiltonien s'obtient à partir du Hamiltonien habituel en faisant la transformation :

$$r \to re^{i\theta} \tag{2.42}$$

où θ est un paramètre réel appelé angle de rotation. Le hamiltonien total du système se transforme en :

$$\begin{aligned} \hat{H}_0(\theta) &= \hat{H}_0(re^{i\theta}) \\ &= -\frac{1}{2}e^{-2i\theta}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r}e^{-2i\theta}\frac{d}{dr} + e^{-2i\theta}\frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - e^{-i\theta}\frac{1}{r} \end{aligned} \tag{2.43}$$

et l'équation aux valeurs propres généralisée à résoudre devient :

$$\mathbf{H}_0(\theta)\mathbf{C}(\theta) = E\mathbf{S}\mathbf{C}(\theta) \tag{2.44}$$

avec

$$\mathbf{H}_0(\theta) = \left(\kappa^2\mathbf{I} - \frac{\kappa^2}{2}\mathbf{S}\right)e^{-2i\theta} - \kappa\mathbf{N}^{-1}e^{-i\theta} \tag{2.45}$$

où $\mathbf{I}$ est la matrice unité et $\mathbf{N} = diag(n+\ell),\ n = 1, 2, \cdots, N$.

Signalons en passant que la méthode de dilatation complexe, aussi appelée la méthode des coordonnées complexes [Balslev and Combes, 1971], est utilisée intensivement en théorie de la diffusion pour le calcul des résonances en physique atomique et moléculaire [Huens, 1996].

Elle peut être étendue à l'équation de Schrödinger dépendante du temps où elle se révèle d'une grande utilité.

Les figures (2.3) à (2.6) montrent les spectres du hamiltonien atomique tourné dans le plan complexe des énergies pour $\theta = 0.1$ rad, $\theta = 0.15$ rad, $\theta = 0.3$ rad et $\theta = 0.5$ rad. Pour avoir ces spectres, nous avons résolu l'équation (2.44) aux moyens des routines de la librairie LAPACK.

Comme attendu, les coupures (états du continuum) sont tournés d'un angle 2θ dans le demi-plan inférieur pourvu que l'on utilise une même échelle pour les parties réelles et imaginaires des énergies.

Les états discrets restent sur l'axe réel, c'est-à-dire que les états liés ne sont pas affectés par la dilation complexe du hamiltonien. Donc Les valeurs propres négatives restent inchangées, tandis que celles du continuum subissent une rotation d'un angle 2θ autour du point de branchement.

Pour déterminer l'angle de rotation complexe graphiquement, il faut nécessairement tenir compte du rapport de deux échelles : échelle sur l'axe réel et l'échelle sur l'axe imaginaire.

Ainsi, nous avons

$$\beta = arctan\left(\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_y} tan(\beta')\right) \tag{2.46}$$

où β est l'angle réel, β' est égal à l'angle mesuré sur le graphique, ε_x est la mesure de l'échelle sur l'axe réel et ε_y est la mesure de l'échelle sur l'axe imaginaire.

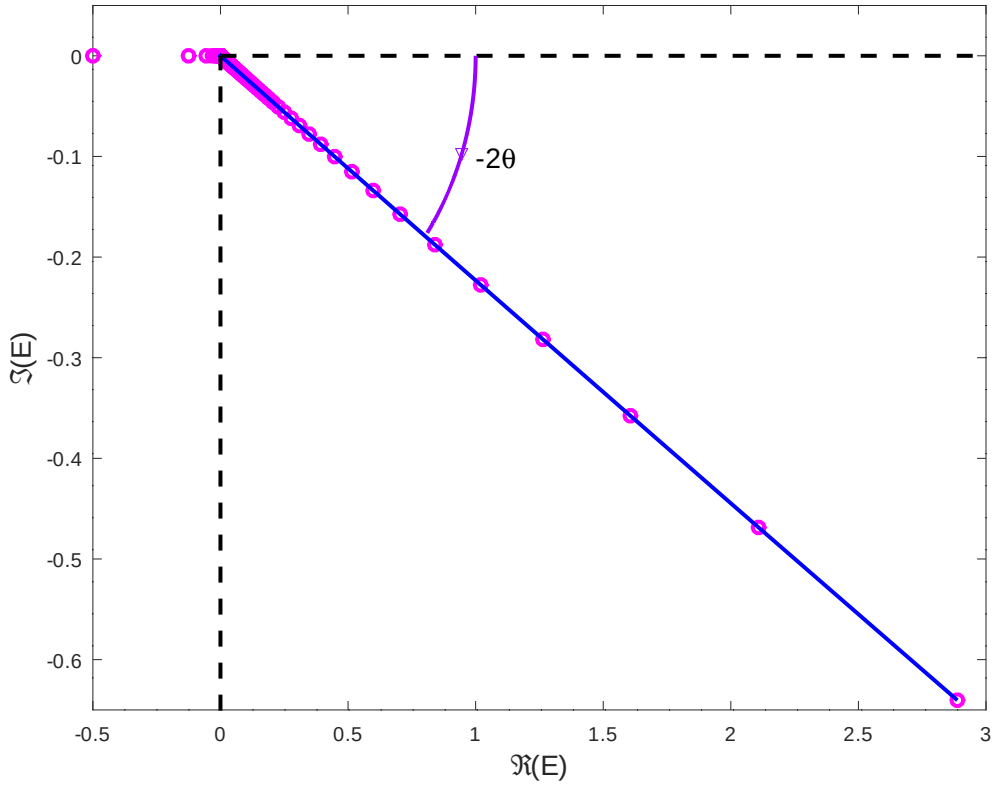


FIGURE 2.3 – Spectre de $\hat{H}_0(\theta)$ lors de l'utilisation d'une dilatation complexe. $\ell = 0$, $\kappa = 0.4$, $N = 1000$ et $\theta = 0.1\ rad$

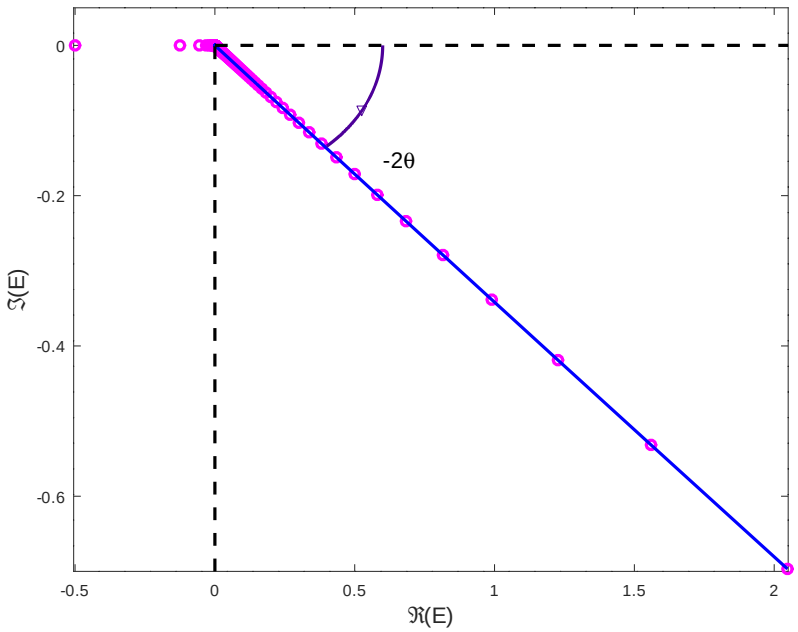


FIGURE 2.4 – Spectre de $\hat{H}_0(\theta)$ lors de l'utilisation d'une dilatation complexe. $\ell = 0$, $\kappa = 0.4$, $N = 1000$ et $\theta = 0.15\ rad$

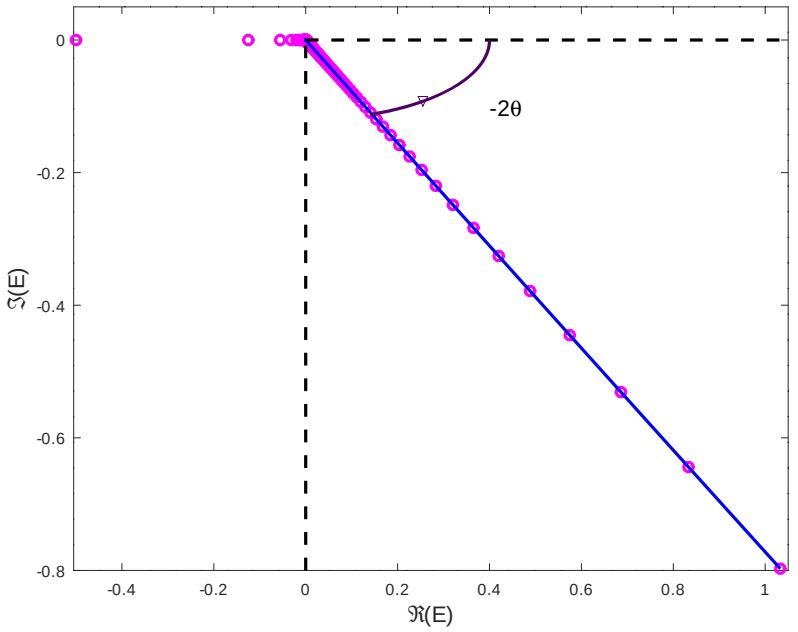


FIGURE 2.5 – Spectre de $\hat{H}_0(\theta)$ lors de l'utilisation d'une dilatation complexe. $\ell = 0$, $\kappa = 0.4$, $N = 1000$ et $\theta = 0.3\ rad$

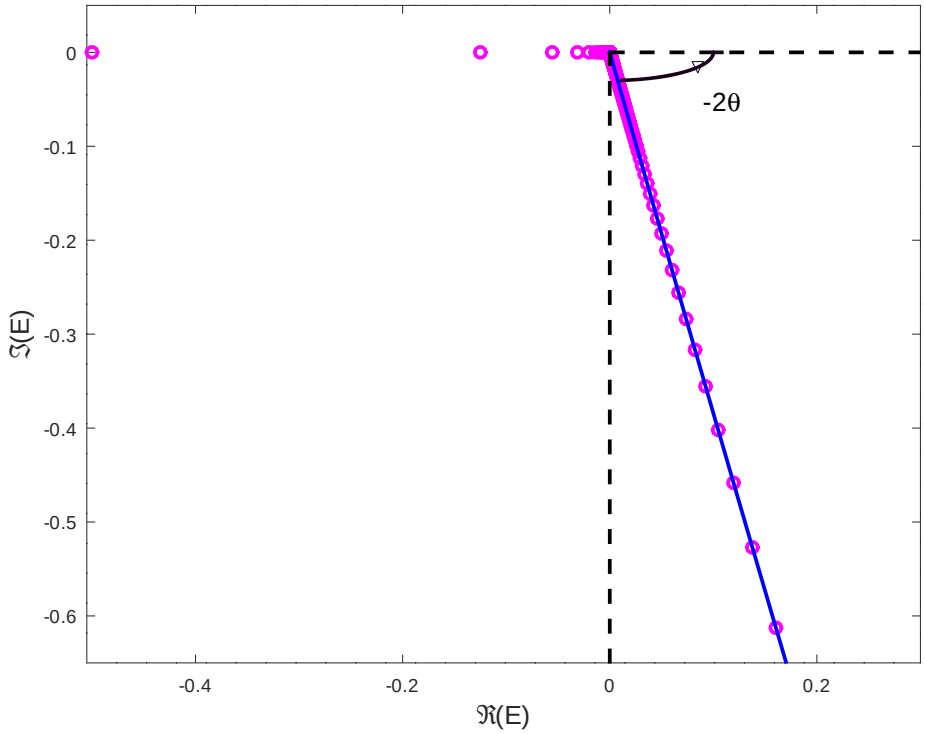


FIGURE 2.6 – Spectre de $\hat{H}_0(\theta)$ lors de l'utilisation d'une dilatation complexe. $\ell = 0$, $\kappa = 0.4$, $N = 1000$ et $\theta = 0.6\ rad$

Compte tenu de l'expression (2.46), nous trouvons que :

- pour la figure 2.3, $\beta' = 40°$ et le rapport d'échelle $\dfrac{\varepsilon_x}{\varepsilon_y} = 0.27$. Dans ce cas, l'angle réelle $\beta = 12.76°$ tandis que $2\theta = 11.46°$
- pour la figure 2.4, $\beta' = 41°$ et le rapport d'échelle $\dfrac{\varepsilon_x}{\varepsilon_y} = 0.37$. Dans ce cas, l'angle réelle $\beta = 17.82°$ tandis que $2\theta = 17.19°$
- pour la figure 2.5, $\beta' = 47°$ et le rapport d'échelle $\dfrac{\varepsilon_x}{\varepsilon_y} = 0.68$. Dans ce cas, l'angle réelle $\beta = 36.09°$ tandis que $2\theta = 34.39°$
- pour la figure 2.6, $\beta' = 73°$ et le rapport d'échelle $\dfrac{\varepsilon_x}{\varepsilon_y} = 1.1$. Dans ce cas, l'angle réelle $\beta = 73.5°$ tandis que $2\theta = 68.78°$

Nous constatons que pour toutes ces figures l'angle β est proche de 2θ. L'écart est dû aux erreurs de mesure et du fait qu'on doit tronquer la base.

Chapitre 3

Résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps en présence du champ laser

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons deux méthodes numériques pouvant être utilisées pour résoudre l'ESDT pour l'atome d'hydrogène en interaction avec un champ laser. Il s'agit de la méthode de Fatunla explicite [Fatunla, 1980], [Frapiccini et al., 2014] et de la méthode de Fatunla implicite [Fatunla, 1978]. Nous introduisons en outre une méthode prédicteur-correcteur, que nous nommons « méthode de Fatunla modifiée », en choisissant la méthode de Fatunla explicite pour prédicteur et la méthode de Fatunla implicite comme correcteur. Pour terminer ce chapitre, nous appliquons ces méthodes à un système différentielle simple tiré de la littérature et à l' ESDT pour le système physique considéré dans notre travail.

3.2 Equation de Schrödinger dépendante du temps (ESDT)

Nous avons vu que le mouvement du noyau peut être séparé de celui des électrons en l'absence du champ extérieur. Lorsque le système atomique interagit avec un champ électromagnétique, ce dernier couple le mouvement du noyau et les mouvements relatifs des électrons. Ce couplage rend impossible la séparation de ces mouvements [Mittleman, 1982]. L'équation de Schrödinger dépendante du temps est pour cette raison difficile à résoudre sans faire des approximations. Pour éviter cette difficulté, nous faisons appel à l'approximation du noyau infiniment lourd. Nous supposons que le noyau est tellement lourd (par rapport à l'électron) qu'il peut être considéré comme fixe et, par conséquent, pris comme

origine du système de coordonnées. Dans le cadre de cette approximation, et en l'absence du champ extérieur, l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour un atome d'hydrogène est donnée par :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}_0\Psi(\vec{r},t) \tag{3.1}$$

en représentation de Schrödinger. $\hat{H}_0$ est le hamiltonien de l'atome isolé.

Lorsque l'atome d'hydrogène interagit avec un champ électromagnétique extérieur, l'ESDT devient :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}\Psi(\vec{r},t),\ \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_G(t) \tag{3.2}$$

où $\hat{H}_G(t)$ est le hamiltonien d'interaction entre le champ électromagnétique et l'atome. Nous nous plaçons dans le cadre de l'approximation dipolaire (approximation des grandes longueurs d'onde). Dans les jauges longueur ($G \equiv L$) et vitesse ($G \equiv V$), le hamiltonien d'interaction s'écrit :

$$H_L(t) = \vec{E}(t).\vec{r} \tag{3.3}$$

$$H_V(t) = -i\vec{A}(t).\vec{\nabla}_r \tag{3.4}$$

où le potentiel vecteur $\vec{A}(t)$ et le champ électrique $\vec{E}(t)$ sont liés par la relation

$$\vec{E}(t) = -\frac{d\vec{A}(t)}{dt} \tag{3.5}$$

3.3 Formulation matricielle de l'ESDT : utilisation de la méthode spectrale de Galerkin

Pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps, nous développons la fonction d'onde $\Psi(\vec{r},t)$ sur une base finie de fonctions Sturmiennes coulombiennes. Plus précisément, nous écrivons

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_{m'}\sum_{\ell'=m'}^{L}\sum_{n'=\ell'+1}^{N} a_{n',\ell',m'}(t)\frac{S^{k_c}_{n',\ell'}(r)}{r}Y_{\ell',m'}(\hat{r}). \tag{3.6}$$

Nous multiplions ensuite chacun des membres de l'ESDT obtenue par $\frac{S^{k_c}_{n,\ell}(r)}{r}Y^*_{\ell,m}(\hat{r})$ et nous intégrons sur tout l'espace. Dans le cas d'une polarisation linéaire, l'interaction ne couple que des états de même nombre quantique m. Nous développons $\Psi(\vec{r},t)$ sur une base comportant les moments angulaires $\ell = m, m+1, ..., m+\ell$ et N fonctions sturmiennes : $n = \ell+1, \ell+2, ..., \ell+N$. Nous arrivons finalement à un système d'équations différentielles ordinaires pour les $a_{n,\ell,m}(t)$ que nous représentons sous forme matricielle [Grosges, 1999],

[Huens, 1996] :

$$i\mathbf{S}\frac{d}{dt}\mathbf{\Psi}(t) = [\mathbf{H}_0 + g(t)\mathbf{V}]\,\mathbf{\Psi} \tag{3.7}$$

où :

- $g(t)$ est la partie scalaire du champ laser dépendante du temps

- $\mathbf{\Psi}$ est un vecteur d'état du système dans la base sturmienne qui contient les coefficients $a_{n,\ell,m}(t)$ [Huens, 1996],

$$\mathbf{\Psi} = \begin{pmatrix} a_{1,m}(t) \\ \vdots \\ a_{N,m}(t) \\ a_{1,m+1}(t) \\ \vdots \\ a_{N,m+1}(t) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ a_{1,m+L}(t) \\ \vdots \\ a_{N,m+L}(t) \end{pmatrix} \tag{3.8}$$

- $\mathbf{S}$ est la matrice de recouvrement, elle est réelle, tridiagonale et symétrique

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S^0 & 0 & & \cdots & 0 \\ 0 & S^1 & \ddots & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & & 0 & S^L \end{bmatrix} \tag{3.9}$$

avec

$$\mathbf{S}^\ell = \begin{bmatrix} s^\ell_{1,1} & s^\ell_{1,2} & & \cdots & 0 \\ s^\ell_{2,1} & s^\ell_{2,2} & \ddots & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & s^\ell_{N-1,N} \\ 0 & \cdots & & s^\ell_{N,N-1} & s^\ell_{N,N} \end{bmatrix} \tag{3.10}$$

où

$$s^\ell_{n,n} = 1, \tag{3.11}$$

$$s^{\ell}_{n,n+1} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{n(n+2\ell+1)}{(n+\ell)(n+\ell+1)}}, \tag{3.12}$$

$$s^{\ell}_{n,n-1} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{(n-1)(n+2\ell)}{(n+\ell-1)(n+\ell)}}. \tag{3.13}$$

- $\mathbf{H}_0$ est la matrice du hamiltonien non perturbé. Elle est aussi tridiagonale, symétrique et réelle.

$$\mathbf{H}_0 = \begin{bmatrix} H^0 & 0 & & \cdots & 0 \\ 0 & H^1 & \ddots & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & & 0 & H^L \end{bmatrix} \tag{3.14}$$

avec

$$\mathbf{H}^l_0 = \begin{bmatrix} h^{\ell}_{1,1} & h^{\ell}_{1,2} & & \cdots & 0 \\ h^{\ell}_{2,1} & h^{\ell}_{2,2} & \ddots & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & h^{\ell}_{N-1,N} \\ 0 & \cdots & & h^{\ell}_{N,N-1} & h^{\ell}_{N,N} \end{bmatrix} \tag{3.15}$$

où

$$h^{\ell}_{n,n} = \frac{\kappa^2}{2} - \frac{\kappa}{n+\ell}, \tag{3.16}$$

$$h^{\ell}_{n,n+1} = \left(-\frac{\kappa^2}{2}\right)\left(-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{n(n+2\ell+1)}{(n+\ell)(n+\ell+1)}}\right), \tag{3.17}$$

$$h^{\ell}_{n+1,n} = \left(-\frac{\kappa^2}{2}\right)\left(-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{(n-1)(n+2\ell)}{(n+\ell-1)(n+\ell)}}\right), \tag{3.18}$$

- $\mathbf{V}$ est la matrice de l'opérateur dipolaire ; c'est une matrice bloc-tridiagonale et hermitienne. Les blocs de la rangée centrale sont nuls, les blocs de la rangée supérieure sont tridiagonaux, avec la diagonale du centre creuse ; et les blocs de la rangée inférieure sont anti-symétriques de ceux de la rangée supérieure.

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} 0 & V^{0,1} & & \cdots & 0 \\ V^{1,0} & 0 & \ddots & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & V^{L-1,L} \\ 0 & \cdots & & V^{L,L-1} & 0 \end{bmatrix} \tag{3.19}$$

avec

$$V^{\ell,\ell+1} = \begin{bmatrix} v_{1,1}^{\ell,\ell+1} & & & & & \cdots & 0 \\ 0 & v_{2,2}^{\ell,\ell+1} & & & & & \vdots \\ v_{3,1}^{\ell,\ell+1} & 0 & \ddots & & & & \\ & v_{4,2}^{\ell,\ell+1} & \ddots & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & \cdots & & & v_{N,N-2}^{\ell,\ell+1} & 0 & v_{N,N}^{\ell,\ell+1} \end{bmatrix} \tag{3.20}$$

$$V^{\ell,\ell-1} = \begin{bmatrix} v_{1,1}^{\ell,\ell-1} & 0 & v_{1,3}^{\ell,\ell-1} & & & \cdots & 0 \\ & v_{2,2}^{\ell,\ell-1} & 0 & v_{2,4}^{\ell,\ell-1} & & & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots & v_{N-2,N}^{\ell,\ell-1} \\ \vdots & & & & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & & & & & v_{N,N}^{\ell,\ell-1} \end{bmatrix} \tag{3.21}$$

La forme explicite de ces éléments de matrice est :

$$v_{n,n}^{\ell,\ell+1} = (-i)(\kappa)\sqrt{\frac{(\ell-m+1)(\ell+m+1)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{(n+2\ell+1)(n+2\ell+2)}{(n+\ell)(n+\ell+1)}} \tag{3.22}$$

$$v_{n,n-2}^{\ell,\ell+1} = (-i)(-\kappa)\sqrt{\frac{(\ell-m+1)(\ell+m+1)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{(n-1)(n-2)}{(n+\ell)(n+\ell-1)}} \tag{3.23}$$

$$v_{n,n+2}^{\ell,\ell-1} = (-i)(\kappa)\sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell+m)}{(2\ell+1)(2\ell-1)}}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{n(n+1)}{(n+\ell)(n+\ell+1)}} \tag{3.24}$$

$$v_{n,n}^{\ell,\ell-1} = (-i)(-\kappa)\sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell+m)}{(2\ell+1)(2\ell-1)}}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{(n+2\ell)(n+2\ell-1)}{(n+\ell)(n+\ell-1)}} \tag{3.25}$$

Dans le cas particulier où $N = 3$, les matrices $\mathbf{S}$, $\mathbf{H}_0$ et $\mathbf{V}$ sont données par les expressions suivantes :

$$\mathbf{S}=\left|\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc}
s^0_{1,1} & s^0_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
s^0_{2,1} & s^0_{2,2} & s^0_{2,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & s^0_{3,2} & s^0_{3,3} & s^0_{3,4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & s^0_{4,3} & s^0_{4,4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & s^1_{1,1} & s^1_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & s^1_{2,1} & s^1_{2,2} & s^1_{2,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s^1_{3,2} & s^1_{3,3} & s^1_{3,4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s^1_{4,3} & s^1_{4,4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s^2_{1,1} & s^2_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s^2_{2,1} & s^2_{2,2} & s^2_{2,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s^2_{3,2} & s^2_{3,3} & s^2_{3,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s^2_{4,3} & s^2_{4,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s^3_{1,1} & s^3_{1,2} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s^3_{2,1} & s^3_{2,2} & s^3_{2,3} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s^3_{3,2} & s^3_{3,3} & s^3_{3,4} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s^3_{4,3} & s^3_{4,4}
\end{array}\right| \tag{3.26}$$

$$\mathbf{H_0}=\left|\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc}
h^0_{1,1} & h^0_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
h^0_{2,1} & h^0_{2,2} & h^0_{2,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & h^0_{3,2} & h^0_{3,3} & h^0_{3,4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & h^0_{4,3} & h^0_{4,4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & h^1_{1,1} & h^1_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & h^1_{2,1} & h^1_{2,2} & h^1_{2,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^1_{3,2} & h^1_{3,3} & h^1_{3,4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^1_{4,3} & h^1_{4,4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^2_{1,1} & h^2_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^2_{2,1} & h^2_{2,2} & h^2_{2,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^2_{3,2} & h^2_{3,3} & h^2_{3,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^2_{4,3} & h^2_{4,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^3_{1,1} & h^3_{1,2} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^3_{2,1} & h^3_{2,2} & h^3_{2,3} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^3_{3,2} & h^3_{3,3} & h^3_{3,4} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^3_{4,3} & h^3_{4,4}
\end{array}\right| \tag{3.27}$$

$$\mathbf{V}=\left|\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc}
0 & 0 & 0 & 0 & v_{1,1}^{0,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{2,2}^{0,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & v_{3,1}^{0,1} & 0 & v_{3,3}^{0,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{4,2}^{0,1} & 0 & v_{4,4}^{0,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
v_{1,1}^{1,0} & 0 & v_{1,3}^{1,0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{1,1}^{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & v_{2,2}^{1,0} & 0 & v_{2,4}^{1,0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{2,2}^{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & v_{3,3}^{1,0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{3,1}^{1,2} & 0 & v_{3,3}^{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & v_{4,4}^{1,0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{4,2}^{1,2} & 0 & v_{4,4}^{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & v_{1,1}^{2,1} & 0 & v_{1,3}^{2,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{1,1}^{2,3} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{2,2}^{2,1} & 0 & v_{2,4}^{2,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{2,2}^{2,3} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{3,3}^{2,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{3,1}^{2,3} & 0 & v_{3,3}^{2,3} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{4,4}^{2,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{4,2}^{2,3} & 0 & v_{4,4}^{2,3} \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{1,1}^{3,2} & 0 & v_{1,3}^{3,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{2,2}^{3,2} & 0 & v_{2,4}^{3,2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{3,3}^{3,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_{4,4}^{3,2} & 0 & 0 & 0 & 0
\end{array}\right| \tag{3.28}$$

En pratique, le développement (3.6) doit être tronqué à cause des limitations imposées par l'outil informatique. La fonction $\Psi(\vec{r},t)$ est approximée par une combinaison linéaire $\Psi_N(\vec{r},t)$ de N fonctions de carré sommable.
Nous écrivons :

$$\Psi_N(\vec{r},t)=\sum_{m}\sum_{\ell=m}^{N_\ell}\sum_{n=\ell+1}^{N_r} a_{n,\ell,m}(t)\frac{S_{n,\ell}^{k_c}(r)}{r}Y_{\ell,m}(\widehat{r}). \tag{3.29}$$

Le nombre d'harmoniques sphériques est pris suffisamment grand pour avoir la convergence dans l'espace angulaire.

3.4 Caractère raide du problème

Un problème est dit numériquement raide si sa solution par une méthode numérique ne peut être donnée en un temps raisonnable. Dans un problème raide, les variables calculées évoluent lentement malgré un pas d'intégration petit.

De plus, il apparaît souvent des instabilités, sous la forme d'oscillations qui font diverger l'algorithme. Lorsque le problème est raide il faut suivre la plus petite échelle de temps du système pour s'assurer de la stabilité de la méthode. Dans la base atomique les différentes composantes énergétiques du paquet d'onde oscillent essentiellement aux fréquences propres, c'est-à- dire aux énergies propres du système. Lorsqu'on augmente la

taille du système, la diagonalisation du hamiltonien atomique génère des énergies propres de plus en plus grandes. Ce sont précisément ces énergies propres élevées qui contrôlent le pas d'intégration sur le temps. Ce temps d'intégration devient petit dans la mesure où il est proportionnel à l'intensité de ces énergies.

Dans la base sturmienne, chaque composante contient toutes les énergies propres, forçant le pas d'intégration à devenir très petit, d'où la « raideur » du système. Pour éviter ce problème de raideur, on peut utiliser une méthode implicite.

Exemple d'un problème raide : Soit un réel $\lambda > 2$. Considérons le système d'équations différentielles [Jedrzejewski, 2005]

$$\begin{cases} u' = (\lambda - 2)u + 2(\lambda - 1)v \\ v' = (1 - \lambda)u + (2\lambda - 1)v \end{cases} \tag{3.30}$$

avec pour conditions initiales, $u(0) = 1$ et $v(0) = 0$. Ce système admet comme solutions exactes $u(x) = 2e^{-x} - e^{-\lambda x}$ et $v(x) = -e^{-x} + e^{-\lambda x}$. Il a deux échelles de temps données par les deux exponentielles. Si on choisit $\lambda = 10000$, on constate que bien que le terme $e^{-\lambda x}$ soit négligeable dans la solution exacte, il introduit une instabilité dans la solution numérique. Pour que la méthode soit stable, il faut que le pas de temps choisi soit très inférieur à $1/\lambda$. Ce phénomène est caractéristique des systèmes raides.

3.5 La méthode de Fatunla explicite

La méthode de Fatunla, valable même pour des systèmes d'équations différentielles *raides*, a été proposée par Fatunla [Fatunla, 1980] en 1980. C'est une méthode explicite d'ordre 4. Fatunla a testé sa méthode sur des systèmes différentiels *raides* et/ou oscillant très rapidement, mais simples. L'efficacité de cette méthode pour des systèmes différentiels *raides* plus complexes a été prouvée par Madroñero et Piraux [Madroñero and Piraux, 2009] qui l'ont appliquée sur l'atome d'hydrogène en interaction avec un champ laser.

Pour introduire la méthode de Fatunla explicite, considérons le système d'équations différentielles

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}) \quad , \ \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \tag{3.31}$$

D'après la méthode de Fatunla, la solution $\mathbf{y}(x)$ de (3.31) sur l'intervalle $(x_n, x_{n+1} = x_n + h)$ peut être approximée par la fonction

$$\mathbf{F}(x) = \left(I - e^{\Omega_1 x}\right)\mathbf{a} - \left(I - e^{-\Omega_2 x}\right)\mathbf{b} + \mathbf{c} \tag{3.32}$$

où I est la matrice identité, $\Omega_i = diag\,(\Omega_{i,1},\, \Omega_{i,2},\, \ldots,\, \Omega_{i,m})$, $i = 1,\, 2$, et $\mathbf{a},\ \mathbf{b},\ \mathbf{c}$ des vecteurs constants de longueur m. Dans l'hypothèse où $\mathbf{F}(x)$ coïncide avec $\mathbf{y}(x)$ en x_n et x_{n+1}, $\mathbf{F}'(x)$ avec $\mathbf{f}(x,\, \mathbf{y})$ en x_n, et $\mathbf{F}''(x)$ avec $\mathbf{f}'(x,\, \mathbf{y})$ en x_n, la solution $\mathbf{y}_{n+1} \equiv \mathbf{y}(x_{n+1})$ de l'équation (3.31) en x_{n+1} peut être exprimée en termes de $\mathbf{y}_n \equiv \mathbf{y}(x_n)$ par [Fatunla, 1980] :

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + R\mathbf{f}_n + S\mathbf{f}_n^{(1)}\ , \tag{3.33}$$

avec $\mathbf{f}_n = \mathbf{f}(x_n,\, \mathbf{y}_n)$, $\mathbf{f}_n^{(1)} = \frac{\mathrm{df}}{\mathrm{d}x}\Big|_{x=x_n}$. R et S sont des matrices diagonales données par

$$R = \Omega_2\Phi - \Omega_1\Psi \quad ,\ S = \Phi + \Psi \tag{3.34}$$

où les matrices Φ et Ψ, diagonales, ont pour éléments diagonaux

$$\Phi_i = \frac{e^{\Omega_{1,i}h} - 1}{\Omega_{1,i}\left(\Omega_{1,i} + \Omega_{2,i}\right)}\ ;\ i = 1,\ 2,\ \ldots,\ m \tag{3.35}$$

et

$$\Psi_i = \frac{e^{-\Omega_{2,i}h} - 1}{\Omega_{2,i}\left(\Omega_{1,i} + \Omega_{2,i}\right)}\ ;\ i = 1,\ 2,\ \ldots,\ m \tag{3.36}$$

Dans le cas où $\Omega_{1,i} = 0$, l'application de la règle de l'Hospital à l'équation (3.35) conduit à

$$\Phi_i = \frac{h}{\Omega_{2,i}} \tag{3.37}$$

et lorsque $\Omega_{2,i} = 0$, l'application de la même règle à (3.36) donne

$$\Psi_i = -\frac{h}{\Omega_{1,i}} \tag{3.38}$$

Les éléments diagonaux des matrices de *raideur* Ω_1 et Ω_2 ont pour expressions [Fatunla, 1980, Madroñero and Piraux, 2009] :

$$\Omega_{1,i} = \frac{1}{2}\left[-D_i + \sqrt{D_i^2 + 4E_i}\right] \tag{3.39}$$

et

$$\Omega_{2,i} = \Omega_{1,i} + D_i\ , \tag{3.40}$$

où les composantes D_i et E_i des vecteurs $\vec{D}$ et $\vec{E}$ sont données, en termes des composantes des dérivées $\mathbf{f}_n^{(k)}$, $k = 0,\, 1,\, 2,\, 3$, de $\mathbf{f}(x,\, \mathbf{y})$ par :

$$D_i = \frac{f_{n,i} f_{n,i}^{(3)} - f_{n,i}^{(1)} f_{n,i}^{(2)}}{f_{n,i}^{(1)} f_{n,i}^{(1)} - f_{n,i} f_{n,i}^{(2)}} \ , \ i = 1,\, 2,\, \ldots,\, m \tag{3.41}$$

et

$$E_i = \frac{f_{n,i}^{(1)} f_{n,i}^{(3)} - f_{n,i}^{(2)} f_{n,i}^{(2)}}{f_{n,i}^{(1)} f_{n,i}^{(1)} - f_{n,i} f_{n,i}^{(2)}} \ , \ i = 1,\, 2,\, \ldots,\, m \tag{3.42}$$

L'*erreur de troncature* pour la formule d'intégration (3.33) est donnée par [Fatunla, 1980, Madroñero and Piraux, 2009] :

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= \frac{h^5}{5!} \frac{1}{\Omega_1 + \Omega_2} \Big[(\Omega_1 + \Omega_2) \mathbf{f}_n^{(4)} + (\Omega_2^4 - \Omega_1^4) \mathbf{f}_n^{(1)} \\ &\quad - (\Omega_1^4 \Omega_2 + \Omega_1 \Omega_2^4) \mathbf{f}_n^{(0)} \Big] + \mathcal{O}(h^6) \end{aligned} \tag{3.43}$$

ou bien

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= \frac{h^5}{5!} \Big[\mathbf{f}_n^{(4)} + (\Omega_2^3 - \Omega_2^2 \Omega_1 + \Omega_2 \Omega_1^2 - \Omega_1^3) \mathbf{f}_n^{(1)} \\ &\quad - \Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1^2 - \Omega_1 \Omega_2 + \Omega_2^2) \mathbf{f}_n^{(0)} \Big] + \mathcal{O}(h^6) \end{aligned} \tag{3.44}$$

Les expresssions (3.41) et (3.42) montrent que D_i et E_i peuvent diverger lorsque les ièmes composantes de deux dérivées successives $\left(f_{n,i}^{(0)} \text{ et } f_{n,i}^{(1)} \text{ ou } f_{n,i}^{(1)} \text{ et } f_{n,i}^{(2)}\right)$ s'annulent. Supposons, par exemple, que $f_{n,i}^{(0)} = 0$ et $\left|f_{n,i}^{(1)}\right| = \epsilon \approx 0$. Compte tenu des relations (3.36) à (3.42), les paramètres de raideur $\Omega_{1,i}$ et $\Omega_{2,i}$ sont dans ce cas proportionnels à $\frac{1}{\epsilon}$. Leurs parties réelles sont donc très grandes en valeur absolue, ce qui conduit à des valeurs énormes pour Φ_i et/ou Ψ_i, à moins que h soit suffisamment petit. En effet, si $\Re(\Omega_{1,i})$ est un nombre positif énorme, l'équation (3.35) montre que l'amplitude de Φ_i devient extrêmement grande, sauf si $e^{\Re(\Omega_{1,i})h}$ est de l'ordre de $\left|\Omega_{1,i}\left(\Omega_{1,i} + \Omega_{2,i}\right)\right|$. Mais alors, $e^{\Re(\Omega_{1,i})h} \approx \left|\Omega_{1,i}\left(\Omega_{1,i} + \Omega_{2,i}\right)\right|$ équivaut à

$$h \approx \frac{1}{\Re(\Omega_{1,i})} \ln \left|\Omega_{1,i}\left(\Omega_{1,i} + \Omega_{2,i}\right)\right| \tag{3.45}$$

Donc, il faut que h soit suffisamment petit si $\Re(\Omega_{1,i})$ est un nombre positif très grand. De la même façon, on peut montrer, à partir de la relation (3.36), que si $\Re(\Omega_{2,i})$ est un nombre négatif très grand en valeur absolue, il faut que

$$h \approx \frac{1}{\Re(\Omega_{2,i})} \ln \left|\Omega_{2,i}\left(\Omega_{1,i} + \Omega_{2,i}\right)\right| \tag{3.46}$$

Le problème de la divergence de la méthode de Fatunla due à la présence des paramètres de raideur de très grande magnitude a été traité par Madroñero et Piraux dans [Madroñero and Piraux, 2009]. Au lieu d'ajuster le pas d'intégration h à partir des relations (3.45) et (3.46) en prenant une très petite valeur pour ce pas, ils proposent de ne pas tenir compte de la contribution de l'itération concernée, c'est-à-dire annuler les composantes diagonales des matrices R et S dans la formule d'intégration (3.33) qui se réduit alors à

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n, \tag{3.47}$$

puis de calculer de nouveau les paramètres de raideur après une modification légère de la valeur de h.

3.6 Méthode de Fatunla implicite

Nous considérons encore une fois le problème de Cauchy de la forme

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}),\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0. \tag{3.48}$$

La méthode de Fatunla implicite pour le problème aux valeurs propres initiales (3.48) est donnée par la formule de récurrence suivante [Fatunla, 1978] :

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y} - (\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\sigma}) + \boldsymbol{\theta}\mathbf{f}_{n+1} \tag{3.49}$$

où $\mathbf{f}_n \equiv \mathbf{f}\left(t_n, \mathbf{y}_n\right)$ et $\mathbf{f}_{n+1} \equiv \mathbf{f}\left(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}\right)$.

$\boldsymbol{\gamma}$, $\boldsymbol{\sigma}$ et $\boldsymbol{\theta}$ sont des matrices diagonales dont les éléments diagonaux sont donnés par [Fatunla, 1978] :

$$^i\gamma = \frac{\left(1-\mathrm{e}^{^i\Omega_1 h}\right)\mathrm{e}^{-^i\Omega_2 h}}{^i\Omega_1\left(\mathrm{e}^{-^i\Omega_2 h}-\mathrm{e}^{^i\Omega_1 h}\right)} \quad , i = 1, 2, \cdots, m \tag{3.50}$$

$$^i\sigma = \frac{\left(1-\mathrm{e}^{-^i\Omega_2 h}\right)\mathrm{e}^{^i\Omega_1 h}}{^i\Omega_2\left(\mathrm{e}^{-^i\Omega_2 h}-\mathrm{e}^{^i\Omega_1 h}\right)} \quad , i = 1, 2, \cdots, m \tag{3.51}$$

$$^i\theta = \frac{\left(1-\mathrm{e}^{^i\Omega_1 h}\right)}{^i\Omega_1\left(\mathrm{e}^{-^i\Omega_2 h}-\mathrm{e}^{^i\Omega_1 h}\right)} + \frac{\left(1-\mathrm{e}^{-^i\Omega_2 h}\right)}{^i\Omega_2\left(\mathrm{e}^{-^i\Omega_2 h}-\mathrm{e}^{^i\Omega_1 h}\right)} \quad , i = 1, 2, \cdots, m \tag{3.52}$$

L'erreur de troncature pour la formule d'intégration (3.49) est donnée par [Fatunla, 1978] :

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= \boldsymbol{y}(t_{n+1}) - \boldsymbol{y}_{n+1} \\ &= \frac{h^6}{720}\Big\{9f_n^{(4)} + 5\left(\Omega_2 - \Omega_1\right) f_n^{(3)} + 5\left(\Omega_1^2 - \Omega_1\Omega_2 + \Omega_2^2\right) f_n^{(2)} \\ &- 9\left(\Omega_2 - \Omega_1\right)\left(\Omega_1^2 + \Omega_2^2\right) f_n^{(1)} + \left[5\Omega_1^2\Omega_2^2 - 9\Omega_1\Omega_2\left(\Omega_1^2 - \Omega_1\Omega_2 + \Omega_2^2\right)\right]\Big\} + O(h^7). \end{aligned} \tag{3.53}$$

Cette équation montre que la formule d'intégration (3.49) est d'ordre 5. Il importe de signaler que la formule d'intégration (3.49) peut être écrite sous une forme itérative [Fatunla, 1978] :

$$\mathbf{y}_{n+1}^{[s+1]} = \mathbf{y}_n - \left(\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\sigma}\right)\mathbf{f}_n + \boldsymbol{\theta}\mathbf{f}\left(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}^{[s]}\right) \tag{3.54}$$

En vue de rendre cette formule itérative convergente, Fatunla l'a modifiée en la mettant sous la forme ci-dessous

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{n+1}^{[s+1]} = &\mathbf{y}_{n+1}^{[s]} - \left[\mathbf{I} - \boldsymbol{\theta}\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}\left(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}^{[s]}\right)\right]^{-1}\left[\mathbf{f}_{n+1}^{[s]} - \boldsymbol{\theta}\mathbf{f}\left(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}^{[s]}\right) - \mathbf{y}_n + \left(\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\sigma}\right)\mathbf{f}_n\right], \\ & s = 0, 1, \cdots \end{aligned} \tag{3.55}$$

La formule d'intégration (3.55), une fois appliquée à un système différentiel raide, converge en général vers la solution après quelques itérations (moins d'une dizaine d'itérations), et aucune contrainte ne doit être imposée sur le pas d'intégration h. Normalement, on utilise la solution numérique en $t = t_n$ comme valeur de départ dans la formule de récurrence (3.55). Autrement dit,

$$\mathbf{y}_{n+1}^{[0]} = \mathbf{y}_n. \tag{3.56}$$

3.7 Schéma prédicteur-correcteur : la méthode de Fatunla modifiée.

3.7.1 Introduction

Les méthodes implicites présentent l'avantage d'être stables. Elles sont malheureusement plus difficiles à mettre en œuvre dans la mesure où il faut en général résoudre un système d'équations non-linéaires à chaque itération. On peut éviter l'impliciticité d'une méthode numérique en faisant appel à un schéma prédicteur-correcteur.

3.7.2 Principe

Une méthode de prédiction-correction procède en deux étapes à chacune des itérations :

- Prédiction : on calcule une approximation de $\mathbf{y}(t_{n+1})$ notée $\tilde{\mathbf{y}}_{n+1}$ à l'aide d'un schéma explicite.

- Correction : on utilise le schéma implicite dans lequel les fonctions $\mathbf{f}$ utilisant $\mathbf{y}_{n+1}$ sont remplacées par les fonctions $\mathbf{f}$ utilisant $\tilde{\mathbf{y}}_{n+1}$.

3.7.3 Exemple

Choisissons la méthode d'Euler explicite pour prédicteur et la méthode des trapèzes (implicite) comme correcteur.

$$\text{Euler explicite : } \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}\left(t_n, \mathbf{y}_n\right) \tag{3.57}$$

$$\text{Trapèze : } \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{h}{2}\Big(\mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n) + \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1})\Big) \tag{3.58}$$

On obtient :

$$\begin{cases} \tilde{\mathbf{y}}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}\left(t_n, \mathbf{y}_n\right) \\ \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \dfrac{h}{2}\Big(\mathbf{f}\left(t_n, \mathbf{y}_n\right) + \mathbf{f}\left(t_{n+1}, \tilde{\mathbf{y}}_{n+1}\right)\Big) \\ \qquad\quad = \mathbf{y}_n + \dfrac{h}{2}\Big(\mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n) + \mathbf{f}\Big(t_{n+1}, \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}\left(t_n, \mathbf{y}_n\right)\Big)\Big) \end{cases} \tag{3.59}$$

On retrouve ici, pour ce cas simple, une formule de Runge-Kutta d'ordre 2, appelée la **méthode de Heun** ou la **méthode d'Euler améliorée** (« improved Euler method »).

Signalons pour terminer cette section qu'on peut, en pratique, utiliser la méthode de Fatunla explicite pour la prédiction, et celle implicite pour la correction. Nous nommons **méthode de Fatunla modifiée** ou **méthode de Fatunla améliorée** la méthode prédicteur-correcteur ainsi obtenue.

3.8 Résultats des simulations numériques

La librairie LAPACK que nous avons utilisé pour trouver les résultats des simulations numériques est une librairie qui contient un grand nombre de routines optimisées pour des problèmes d'algèbre linéaire.

On peut y traiter des données réelles ou complexes, en simple ou en double précision, en tenant compte d'éventuelles symétries et par différents algorithmes.

3.8.1 Cas d'un système modèle

Dans cette sous-section, nous appliquons les méthodes de Fatunla explicite et implicite, ainsi que la méthode de Fatunla modifiée, au problème de cauchy défini par :

$$\begin{cases} y_1'(x) = -2000y_1(x) + 1000y_2(x) + 1 \\ y_2'(x) = y_1(x) - y_2(x) \\ y_1(0) = y_2(0) = 0 \end{cases} \tag{3.60}$$

où $y_1'(x) \equiv \dfrac{dy(x)}{dx}$ et $x \in [0, 5]$.
Nous commençons par établir la solution analytique de ce problème. Par la suite, nous présentons et commentons les résultats des simulations numériques.

Signalons en passant que pour le problème de Cauchy en question, les valeurs propres du jacobien du système différentielle considéré sont $\lambda_1 = -2000.5$ et $\lambda_2 = -0.5$. Les matrices de raideur sont invariantes et données par les expressions

$$\Omega_1 = \begin{pmatrix} -0.49987499 & 0 \\ 0 & -0.49987500 \end{pmatrix} \tag{3.61}$$

$$\Omega_2 = \begin{pmatrix} 2000.50012 & 0 \\ 0 & 2000.50012 \end{pmatrix} \tag{3.62}$$

3.8.1.1 Solution analytique

On a une équation différentielle de la forme

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx} = \mathbf{A}\mathbf{y} + \mathbf{C} \tag{3.63}$$

où **A** est une matrice carré d'ordre 2 tandis que **y** et **C** sont des vecteurs colonnes de dimension 2 :

$$\mathbf{y}' = \begin{pmatrix} -2000 & 1000 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \mathbf{y} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.64}$$

avec $y(0) = 0$. On peut réécrire l'expression (3.64) de la manière suivante :

$$\begin{pmatrix} y_1' \\ y_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2000 & 1000 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.65}$$

En utilisant la transformation de Laplace, on a :

$$\mathscr{L}\{y'\} = \mathscr{L}\{Ay\} + \mathscr{L}\{C\} \tag{3.66}$$

ou encore :

$$s\tilde{y}(s) - y(0) = A\tilde{y}(s) + \tilde{C}(s) \tag{3.67}$$

ce qui donne :

$$(sI - A)\tilde{y}(s) = \tilde{C}(s) \tag{3.68}$$

car $y(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Sous forme matricielle, nous avons :

$$\left[s \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -2000 & 1000 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \tilde{y}_1 \\ \tilde{y}_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{s} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.69}$$

qu'on peut écrire sous la forme

$$\begin{pmatrix} s + 2000 & -1000 \\ -1 & s + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{y}_1 \\ \tilde{y}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{s} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.70}$$

On peut l'écrire sous forme d'un système de deux équations à deux inconnues

$$\begin{cases} (s + 2000)\tilde{y}_1 - 1000\tilde{y}_2 = \frac{1}{s} \\ -\tilde{y}_1 + (s + 1)\tilde{y}_2 = 0 \end{cases} . \tag{3.71}$$

De la deuxième relation de ce système, on tire $\tilde{y}_1 = (s+1)\tilde{y}_2$ et en remplaçant l'expression de $\tilde{y}_1$ dans la première relation de ce système, on obtient :
$(s + 2000)(s + 1)\tilde{y}_2 - 1000\tilde{y}_2 = \frac{1}{s}$ ce qui donne

$$\tilde{y}_2 = \frac{1}{s(s^2 + 2001s + 1000)}. \tag{3.72}$$

En insérant l'expression de $\tilde{y}_2$ dans l'expression de $\tilde{y}_1$ on trouve

$$\tilde{y}_1 = \frac{s+1}{s(s^2+2001s+1000)}. \tag{3.73}$$

Après avoir factorisé le dénominateur on a :

$$\tilde{y}_1 = \frac{s+1}{s(s-a)(s-b)} \tag{3.74}$$

et

$$\tilde{y}_2 = \frac{1}{s(s-a)(s-b)} \tag{3.75}$$

en utilisant maple, nous avons trouvés les valeurs de a et b, où nous avons fixés trente deux chiffres significatifs : $a = -0.49987500000781249902343765 26$ et
$b = -2000.50012499999218750097656234 74$. On pose :

- pour $\tilde{y}_1$,

$$\frac{s+1}{s(s-a)(s-b)} = \frac{A}{s} + \frac{B}{s-a} + \frac{C}{s-b} \tag{3.76}$$

- pour $\tilde{y}_2$,

$$\frac{1}{s(s-a)(s-b)} = \frac{A}{s} + \frac{B}{s-a} + \frac{C}{s-b}. \tag{3.77}$$

Après quelques calculs on trouve :

- Pour $\tilde{y}_1$:

$$\begin{cases} A = \dfrac{1}{ab} \\ B = -\dfrac{a+1}{a(b-a)} \\ C = \dfrac{b+1}{b(b-a)} \end{cases} \tag{3.78}$$

- Pour $\tilde{y}_2$:

$$\begin{cases} A = \dfrac{1}{ab} \\ B = -\dfrac{1}{a(b-a)} \\ C = \dfrac{1}{b(b-a)} \end{cases} \tag{3.79}$$

Ce qui donne

$$\begin{cases} \tilde{y}_1 = \dfrac{1}{abs} - \dfrac{a+1}{a(b-a)s} + \dfrac{b+1}{b(b-a)s} \\ \tilde{y}_2 = \dfrac{1}{abs} - \dfrac{1}{a(b-a)s} + \dfrac{1}{b(b-a)s} \end{cases} \tag{3.80}$$

On trouve y_1 ety_2 en faisant la transformation inverse de Laplace [Lan 2011].

$$\begin{cases} y_1 = \dfrac{1}{ab} - \dfrac{a+1}{a(b-a)}e^{ax} + \dfrac{b+1}{b(b-a)}e^{bx} \\ y_2 = \dfrac{1}{ab} - \dfrac{1}{a(b-a)}e^{ax} + \dfrac{1}{b(b-a)}e^{bx} \end{cases} \tag{3.81}$$

Les solutions exactes sont donc :

$$\begin{cases} y_1(x) = -4.97 \times 10^{-4}e^{-2000.5x} - 5.034 \times 10^{-4}e^{-0.5x} + 0.001 \\ y_2(x) = 2.5 \times 10^{-7}e^{-2000.5x} - 1.007 \times 10^{-3}e^{-0.5x} + 0.001 \end{cases} \tag{3.82}$$

3.8.1.2 Présentation des résultats

Le tableau 3.1 montre les résultats numériques obtenus en rapport avec l'exemple ci-haut (3.60) en utilisant les méthodes de Fatunla explicite, Fatunla implicite et Fatunla modifiée.

La première colonne indique les valeurs de la variable x, la deuxième colonne indique l'erreur entre les valeurs trouvées par la méthode de Fatunla explicite et les valeurs exactes, la troisième colonne indique l'erreur entre les valeurs trouvées par la méthode de Fatunla implicite et les valeurs exactes, la quatrième colonne indique l'erreur entre les valeurs trouvées par la méthode de Fatunla modifiée et les valeurs exactes et la dernière colonne indique les valeurs exactes.

TABLEAU 3.1 – Résultats obtenus pour l'exemple (3.60) en utilisant les méthodes de Fatunla explicite, Fatunla implicite et Fatunla modifiée.

x	$y_1^{FE}(x) - y_1(x)$	$y_1^{FI}(x) - y_1(x)$	$y_1^{FM}(x) - y_1(x)$	$y_1(x)$
0.0	0.00000000000000000E+00	0.00000000000000000E+00	0.00000000000000000E+00	0.00000000000000000E+00
0.5	-0.389424679210642702 8E-06	-0.38942468131608734 26E-06	-0.38942663808989667 64E-06	0.61076998252135485 2E-03
1.0	-0.303303202154735067 6E-06	-0.30330320274916648 57E-06	-0.30330320291776936 63E-06	0.69684841121170001 0E-03
1.5	-0.236227534979464835 7E-06	-0.23622753567392371 89E-06	-0.23622753587088916 26E-06	0.76389054888370058 8E-03
2.0	-0.183985687872841001 7E-06	-0.18398568859401290 30E-06	-0.18398568879855480 88E-06	0.81610628158254356 4E-03
2.5	-0.143297153504925253 6E-06	-0.14329715420703068 56E-06	-0.14329715440616487 66E-06	0.85677447667966219 1E-03
3.0	-0.111606910515811071 3E-06	-0.11160691117201239 49E-06	-0.11160691135812706 34E-06	0.88844887633408286 E-03
3.5	-0.869249819010266125 9E-07	-0.86924982497288999 92E-07	-0.86924982666403527 06E-07	0.91311846940156896 2E-03
4.0	-0.677014751467685445 6E-07	-0.67701475677509845 32E-07	-0.67701475828040997 41E-07	0.93233236684085214 1E-03
4.5	-0.527292573068040685 0E-07	-0.52729257771842590 72E-07	-0.52729257903738835 49E-07	0.94729710047898608 6E-03
5.0	-0.410681535387469345 9E-07	-0.41068153941185825 42E-07	-0.41068154055327290 94E-07	0.95895237518667976 7E-03
x	$y_2^{FE}(x) - y_2(x)$	$y_2^{FI}(x) - y_2(x)$	$y_2^{FM}(x) - y_2(x)$	$y_2(x)$
0.0	-0.172500000000000000 E-17	-0.172500000000000000 E-17	-0.172500000000000000 E-17	0.172500000000000000 E-17
0.5	0.410995547874713897E-15	-0.351168908816727800E-15	0.410995547874713897E-15	0.220955876699081457E-03
1.0	0.642596421518665093E-15	-0.545969273343929944E-15	-0.883075432395417959E-15	0.393241905532584052E-03
1.5	0.751136213193916766E-15	-0.637434410588786643E-15	-0.103126683979221696E-14	0.527426785992808764E-03
2.0	0.780240913703112119E-15	-0.661742392967440160E-15	-0.107072395919859063E-14	0.631936607630902296E-03
2.5	0.759736333179565042E-15	-0.644123565830375587E-15	-0.104229240565712331E-14	0.713334025740640290E-03
3.0	0.710141270307816191E-15	-0.601933358194476636E-15	-0.974069661087403767E-15	0.776730360851373199E-03
3.5	0.645325305902278920E-15	-0.546901412081030073E-15	-0.885045930237895477E-15	0.826106562195424443E-03
4.0	0.574446234748545337E-15	-0.486771062471755243E-15	-0.787758119896129214E-15	0.864563189931237145E-03
4.5	0.503355766279379956E-15	-0.426488817031943472E-15	-0.690215374944375622E-15	0.894515113662791183E-03
5.0	0.435613924287537805E-15	-0.369062688223259107E-15	-0.597288562803839147E-15	0.917843153276243555E-03

3.8.2 Cas de l'atome d'hydrogène en présence d'un champ laser

Nous présentons, dans ce paragraphe, les résultats des simulations numériques concernant la solution numérique de l'ESDT pour l'atome d'hydrogène en interaction avec un champ laser. Nous nous sommes limités à une polarisation linéaire pour le champ laser et avons choisi l'axe de polarisation selon OZ. L'intensité de la radiation I qui s'exprime en W/cm^2 est reliée à l'amplitude du champ électrique $\mathcal{E}_0$ par la relation :

$$I = \frac{1}{2}\epsilon_0 c\varepsilon_0, \tag{3.83}$$

où $c = 2.9979246 \times 10^8\ m/s$ est la vitesse de la lumière. Ainsi, en notant $\tau = n_c\dfrac{2\pi}{\omega}$ la durée de l'interaction, nous avons utilisé deux formes pour le potentiel vecteur $\mathbf{A}(t)$ (l'expression est donnée en unités atomiques) :

- une impulsion carrée :

$$\mathbf{A}(t) = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{I}}{\omega} sin(\omega t)\vec{e}_z & \text{si } 0 \leq t \leq \tau; \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{3.84}$$

- une enveloppe cosinus carré,

$$\mathbf{A}(t) = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{I}}{\omega} cos^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) sin(\omega t)\mathbf{e}_z & \text{si} \quad -\frac{\tau}{2} \leq t \leq \frac{\tau}{2} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{3.85}$$

Dans ce cas, les dérivées $\mathbf{f}^0$, $\mathbf{f}^1$, $\mathbf{f}^2$, $\mathbf{f}^3$ et $\mathbf{f}^4$ sont obtenues à partir des expressions suivantes :

$$iSf_n^{(0)} = [A + g(t_n)V]y_n \tag{3.86}$$

$$iSf_n^{(1)} = [A + g(t_n)V]f_n^{(0)} + g'(t_n)Vy_n \tag{3.87}$$

$$iSf_n^{(2)} = [A + g(t_n)V]f_n^{(1)} + 2g'(t_n)Vf_n^{(0)} + g''(t_n)Vy_n \tag{3.88}$$

$$iSf_n^{(3)} = [A + g(t_n)V]f_n^{(2)} + 3g'(t_n)Vf_n^{(1)} + 3g''(t_n)Vf_n^{(0)} + g^{(3)}(t_n)Vy_n \tag{3.89}$$

$$\begin{aligned} iSf_n^{(4)} =& [A + g(t_n)V]f_n^{(3)} + 4g'(t_n)Vf_n^{(2)} + 6g''(t_n)Vf_n^{(1)} \\ &+ 4g^{(3)}(t_n)Vf_n^{(0)} + g^{(4)}(t_n)Vy_n \end{aligned} \tag{3.90}$$

où

$$g'(t) = A_0\omega cos^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) cos(\omega t) - \frac{2\pi A_0}{\tau} cos\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) sin\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) sin(\omega t) \tag{3.91}$$

$$g''(t) = -\left(\omega^2 + \frac{2\pi^2}{\tau^2}\right) A_0 cos^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) sin(\omega t) - \frac{4A_0\pi\omega}{\tau} cos\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) sin\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) cos(\omega t) + \frac{2A_0\pi^2}{\tau^2} sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) sin(\omega t) \tag{3.92}$$

$$g^{(3)}(t) = -\left(\omega^3 + \frac{6\pi^2\omega}{\tau^2}\right) A_0 cos^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) cos(\omega t) + \frac{6\pi^2\omega}{\tau^2} A_0 sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) cos(\omega t) + \left(\frac{8\pi^3}{\tau^3} + \frac{6\omega^2\pi}{\tau}\right) A_0 cos\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) sin\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) sin(\omega t) \tag{3.93}$$

$$g^{(4)}(t) = \left(\omega^4 + \frac{12\pi^2\omega^2}{\tau^2} + \frac{8\pi^4}{\tau^4}\right) A_0 cos^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) sin(\omega t) - \left(\frac{8\pi^4}{\tau^4} + \frac{12\pi^2\omega^2}{\tau^2}\right) A_0 sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) sin(\omega t) + \left(\frac{32\pi^3\omega}{\tau^3} + \frac{8\omega^3\pi}{\tau}\right) A_0 cos\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) sin\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) sin(\omega t) \tag{3.94}$$

Les figures 3.1 et 3.2 montrent l'évolution de la population dans l'état fondamental de l'atome d'hydrogène $|\Psi_{100}\rangle$ pris comme état initial et dans l'état $|\Psi_{210}\rangle$ de ce même atome lorsque ce dernier est exposé à un champ laser de potentiel vecteur (3.84), de fréquence 0.375 *u.a* (fréquence de résonance entre les états $|\Psi_{100}\rangle$ et $|\Psi_{210}\rangle$) et d'intensité $I = 10^{13}\ W/cm^2$ et d'intensité $I = 10^{12}\ W/cm^2$ respectivement. Les paramètres de la base sturmienne utilisée ont été choisis comme suit : $L = 6$, $N = 200$ pour la figure 3.1 et $N = 300$ pour la figure 3.2, $\kappa = 0.025$.

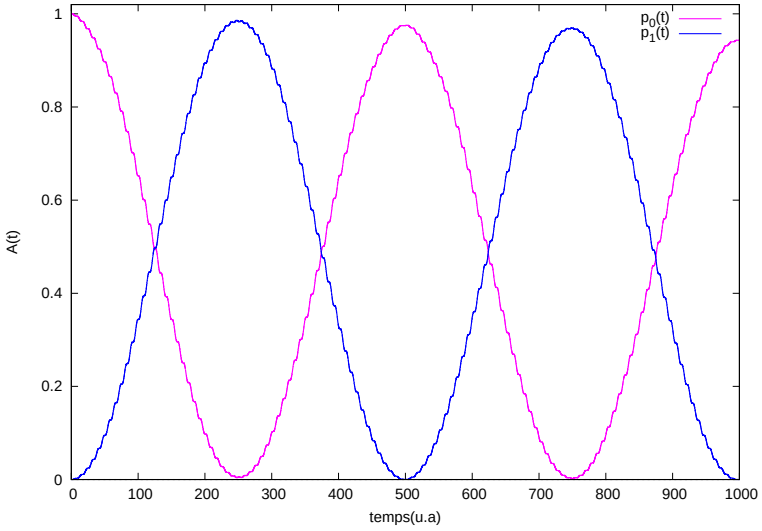


FIGURE 3.1 – Evolution de la population dans les états $|\Psi_{100}\rangle$ et $|\Psi_{210}\rangle$ pour $I = 10^{13}\ W/cm^2$

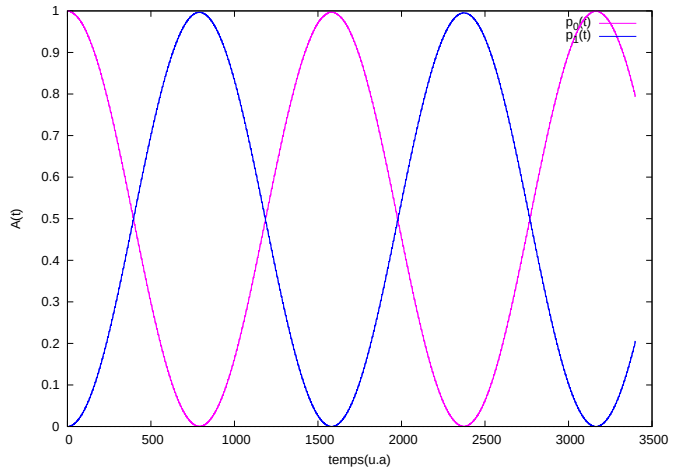


FIGURE 3.2 – Evolution de la population dans les états $|\Psi_{100}\rangle$ et $|\Psi_{210}\rangle$ pour une intensité $I = 10^{12}\ W/cm^2$.

Nous constatons que la population oscille presque exclusivement entre l'état initial et l'état $|\Psi_{210}\rangle$ (les oscillations de Rabi). La période de Rabi calculée à partir de cette figure est presque égale à celle théorique que nous trouvons à partir de la relation $T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R}$, où la fréquence de Rabi Ω_R est définie par $\Omega_R = A_{max}|\langle\Psi_{100}|\hat{p}_z|\Psi_{210}\rangle|$ (cfr annexe C).

La figure 3.3 présente l'évolution temporelle de la population de l'état fondamental (état initial) lorsque le potentiel vecteur (3.85) est utilisé. Le nombre de cycles optiques n_c vaut 4, l'intensité du champ laser $I = 10^{15}\ W/cm^2$, $L = 6,\ N = 400,\ \omega = 0.3\ u.a$. Les méthodes utilisées sont la méthode de Fatunla explicite et la méthode de Fatunla modifiée. Nos résultats coïncident avec ceux que l'on trouve dans la littérature [Madroñero and Piraux, 2009].

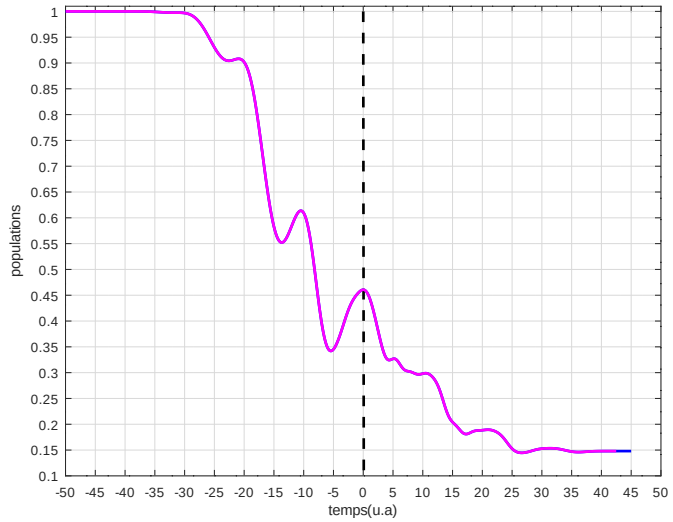


FIGURE 3.3 – Evolution de la population dans l'état fondamental (initial) de l'atome d'hydrogène .

Conclusion générale et recommandations

Notre travail a porté sur la résolution numérique de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène exposé à un champ laser. Nous avons fait appel à quatre méthodes numériques pour résoudre cette question : la méthode spectrale de Galerkin, la méthode de Fatunla explicite, la méthode de Fatnula implicite, et une méthode prédicteur-correcteur que nous avons construis à partir des deux méthodes de Fatunla précitées.

Après un premier chapitre consacré aux fonctions sturmiennes, nous avons résolu l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour l'atome d'hydrogène à l'aide de la méthode spectrale de Galerkin basée sur le développement de la solution sur une base finie de fonctions sturmiennes coulombiennes. Nous avons comparé nos résultats (énergies des états liés et fonctions d'onde radiales normalisées) avec ceux analytiques et avons trouvé que tous ces résultats coïncident bien. Par la suite nous avons appliqué les méthodes de Fatunla explicite et implicite, ainsi que la méthode prédicteur-correcteur ci-haut mentionnée, à l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour l'atome d'hydrogène en interaction avec un champ laser.

Les résultats que nous avons obtenus sont qualitativement et quantitativement comparables aux résultats théoriques et à ceux que l'on trouve dans la littérature.

Notre travail n'est cependant pas exhaustif. En effet, les codes que nous avons mis au point ont été testés sur de petites bases faute d'outils informatiques adéquats. L'université du Burundi ne dispose d'aucun serveur de calcul digne de son nom. Nous nous sommes contentés de nos propres ordinateurs. Deux d'entre-eux sont à un certain moment tombés en panne parce qu'ils ont été surchargés. Les coupures répétitives du courant électrique ont elles aussi perturbé nos calculs. Avec des bases de dimensions réalistes, certains de nos codes peuvent demander un temps de calcul de plus d'une semaine à nos machines. Il est malheureusement très rare que le courant soit disponible pendant toute une semaine d'affilée. C'est la raison pour laquelle nous n'avons pas pu faire une étude complète sur l'efficacité des différentes méthodes numériques considérées dans notre travail.

Nous recommandons à l'Université du Burundi de chercher un serveur puissant qui servira aux futurs chercheurs de faire une étude sur des bases de grande dimension, des batteries et des onduleurs puissants qui continueront à alimenter le serveur au moment où il y a coupure du courant électrique.

Annexe A

Les approximants de Padé

Soit une fonction $f(z)$ donnée par son développement en série de puissances valable au voisinage de l'origine :

$$f(z) = c_0 + c_1\, z + c_2\, z^2 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\, z^n. \tag{A.1}$$

On veut trouver un ensemble de fractions rationnelles dépendantes de z qui approximent valablement f(z) au voisinage de l'origine. Les approximants de Padé offrent une solution à ce problème. Cette solution ne prétend pas être optimale, mais elle présente l'avantage de se laisser calculer assez facilement tout en accélérant la convergence de la série initiale, loin de l'origine, dans un certain nombre de cas.

A.1 Définition des approximants de Padé

Suivant la notation de Baker et Graves–Morris [Baker and Graves-Morris, 1981], l'approximant de Padé de f(z), qui est le rapport de deux polynômes $p_l(z)$ et $q_m(z)$ de degrés l et m respectivement, est noté $[l/m]_f(z)$:

$$[l/m]_f(z) = \frac{p_l(z)}{q_m(z)} = \frac{a_0 + a_1\, z + a_2\, z^2 + \cdots + a_l\, z^l}{b_0 + b_1\, z + b_2\, z^2 + \cdots + b_m\, z^m} \tag{A.2}$$

Les coefficients a_n et b_n de cette fraction rationnelle sont tels que $a_l \neq 0$ et $b_m \neq 0$ et tels que le développement en série de MacLaurin de $[l/m]_f(z)$ coïncide avec la série f(z) aussi loin que possible, c'est–à–dire généralement jusqu'au terme en z^{l+m} inclus. En d'autres termes, la différence entre la série et cette fraction rationnelle commencera avec un terme de degré $l + m + 1$:

$$f(z) - [l/m]_f(z) = O\left(z^{l+m+1}\right). \tag{A.3}$$

Pour obtenir les coefficients a_n et b_n de l'approximant $[l/m]_f(z)$, on procède comme suit [Brezinski, 1978] : On écrit la relation (A.3) sous la forme

$$\Big(c_0+c_1\,z+\cdots+c_{l+m}\,z^{l+m}\Big)\Big(b_0+b_1\,z+\cdots+b_m\,z^m\Big)-\Big(a_0+a_1\,z+\cdots+a_l\,z^l\Big)=O\Big(z^{l+m+1}\Big). \tag{A.4}$$

Cette équation devant être valable pour tout z, on obtient le système linéaire suivant, en annulant les coefficients de z^{l+1} , z^{l+2} , ... , z^{l+m} :

$$\begin{cases} c_{l+1}\,b_0+c_l\,b_1+\cdots+c_{l-m+1}\,b_m=0 \\ c_{l+2}\,b_0+c_{l+1}\,b_1+\cdots+c_{l-m+2}\,b_m=0 \\ \vdots \\ c_{l+m}\,b_0+c_{l+m-1}\,b_1+\cdots+c_l\,b_m=0 \end{cases} \tag{A.5}$$

Etant donné qu'une fraction rationnelle n'est définie qu'à un facteur multiplicatif près pour le numérateur et le dénominateur, b_0 peut être posé égal à 1 sans que cela altère la généralité du développement, puisque f(z) doit être définie à l'origine ($b_0 \neq 0$). Le système (A.5) devient :

$$\begin{cases} c_{l+1}+c_l\,b_1+\cdots+c_{l-m+1}\,b_m=0 \\ c_{l+2}+c_{l+1}\,b_1+\cdots+c_{l-m+2}\,b_m=0 \\ \vdots \\ c_{l+m}+c_{l+m-1}\,b_1+\cdots+c_l\,b_m=0 \end{cases} \tag{A.6}$$

Dans les relations (A.5) et (A.6), on fera la convention que $c_n = 0$ si l'indice n est négatif.

Les coefficients a_n sont alors calculés grâce au système des relations

$$\begin{cases} a_0=c_0 \\ a_1=c_1+b_1\,c_0 \\ a_2=c_2+b_1\,c_1+b_2\,c_0 \\ \vdots \\ a_l=c_l+\sum_{n=1}^{min(l\,,\,m)}b_n\,c_{l-n} \end{cases} \tag{A.7}$$

Les polynômes q_m et p_l sont exprimés en termes des coefficients c_n de la série f(z) en utilisant les formules suivantes [Baker and Graves-Morris, 1981, Kukulin et al., 1989] :

$$q_m(z)=\begin{vmatrix} c_{l-m+1} & c_{l-m+2} & \cdots & c_{l+1} \\ c_{l-m+2} & c_{l-m+3} & \cdots & c_{l+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{l-1} & c_l & \cdots & c_{l+m-1} \\ c_l & c_{l+1} & \cdots & c_{l+m} \\ z^m & z^{m-1} & \cdots & z^0 \end{vmatrix} \tag{A.8}$$

et

$$p_l(z) = \begin{vmatrix} c_{l-m+1} & c_{l-m+2} & \cdots & c_{l+1} \\ c_{l-m+2} & c_{l-m+3} & \cdots & c_{l+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{l-1} & c_l & \cdots & c_{l+m-1} \\ c_l & c_{l+1} & \cdots & c_{l+m} \\ \sum_{n=0}^{l-m} c_n\, z^{m+n} & \sum_{n=0}^{l-m+1} c_n\, z^{m+n-1} & \cdots & \sum_{n=0}^{l} c_n\, z^{n} \end{vmatrix} \tag{A.9}$$

Ces deux formules sont alors utilisées pour calculer les approximants de Padé $[l/m]_f(z)$ qui, compte tenu de la définition (A.2), vont se présenter sous forme de rapports de deux déterminants :

$$[l/m]_f(z) = \frac{\begin{vmatrix} c_{l-m+1} & c_{l-m+2} & \cdots & c_{l+1} \\ c_{l-m+2} & c_{l-m+3} & \cdots & c_{l+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{l-1} & c_l & \cdots & c_{l+m-1} \\ c_l & c_{l+1} & \cdots & c_{l+m} \\ \sum_{n=0}^{l-m} c_n\, z^{m+n} & \sum_{n=0}^{l-m+1} c_n\, z^{m+n-1} & \cdots & \sum_{n=0}^{l} c_n\, z^{n} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} c_{l-m+1} & c_{l-m+2} & \cdots & c_{l+1} \\ c_{l-m+2} & c_{l-m+3} & \cdots & c_{l+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{l-1} & c_l & \cdots & c_{l+m-1} \\ c_l & c_{l+1} & \cdots & c_{l+m} \\ z^m & z^{m-1} & \cdots & z^0 \end{vmatrix}} \tag{A.10}$$

Toutefois, il est beaucoup plus convenable (et plus économique) de calculer ces approximants à l'aide d'un algorithme d'accélération de la convergence appelé *algorithme epsilon de Wynn* [Brezinski, 1978] (Annexe B).

Les approximants de Padé sont placés dans un tableau à double entrée appelé la *table de Padé* :

TABLEAU A.1 – Table de Padé pour $l\,,\, m = 0\,,\, 1\,,\, \ldots\,,\, 4$.

$l \backslash m$	0	1	2	3	4
0	[0/0]	[1/0]	[2/0]	[3/0]	[4/0]
1	[0/1]	[1/1]	[2/1]	[3/1]	[4/1]
2	[0/2]	[1/2]	[2/2]	[3/2]	[4/2]
3	[0/3]	[1/3]	[2/3]	[3/3]	[4/3]
4	[0/4]	[1/4]	[2/4]	[3/4]	[4/4]

Dans une table de Padé, le premier indice l indique la colonne et le second m la ligne du

tableau. La première ligne de la table de Padé est constituée par les sommes partielles de la série (A.1).

A.2 Propriétés des approximants de Padé

Nous allons donner un certain nombre de théorèmes concernant les propriétés des approximants de Padé sans les démontrer. Les démonstrations de ces théorèmes peuvent être trouvées dans [Bak65] et dans [Bak81].

Théorème A.1 (Unicité)**.** *S'il existe, l'approximant de Padé* $\left[l/m\right]_f(z)$ *est unique.*

Théorème A.2. *Si* $f(0) \neq 0$*, alors :*

$$\left[l/m\right]_{\frac{1}{f}}(z) = \frac{1}{\left[m/l\right]_f(z)}. \tag{A.11}$$

On voit que ce résultat relie les deux moitiés de la table de Padé. La série $g(z) \equiv \frac{1}{f(z)}$ s'appelle la série réciproque de $f(z)$. Son étude est très importante ; l'approximant $\left[l/m\right]_g(z)$ est en effet l'inverse de $\left[m/l\right]_f(z)$ d'après le théorème précédent.

Théorème A.3 (Invariance des approximants de Padé diagonaux sous la transformation homographique sur la variable)**.** *Soit la fonction* $f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i$*. Si l'on fait le changement de variable*

$$w = \frac{a\,z}{1 + b\,z} \tag{A.12}$$

et si l'on définit une nouvelle fonction g par l'équation

$$g(w) = f(z)\ , \tag{A.13}$$

alors :

$$\left[l/l\right]_g(w) = \left[l/l\right]_f(z). \tag{A.14}$$

Cette propriété est très importante parce qu'elle donne naissance à la convergence des approximants de Padé dans une région plus vaste que le cercle de convergence de la série de Taylor de $f(z)$. Elle prouve donc que les approximants de Padé sont efficaces pour faire la continuation analytique de la fonction $f(z)$ en-dehors du cercle de convergence de la série de Taylor correspondant à cette fonction.

Théorème A.4 (Invariance des approximants de Padé diagonaux sous la transformation homographique sur la fonction)**.** *Soit la fonction* $f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i\, z^i$ *et une fonction g définie par*

$$g(z) = \frac{a + b\,f(z)}{c + d\,f(z)}. \tag{A.15}$$

Si $c + d\,f(0) \neq 0$, *alors*

$$\Big[l/l\Big]_g(z) = \frac{a + b\Big[l/l\Big]_f(z)}{c + d\Big[l/l\Big]_f(z)} \tag{A.16}$$

pourvu que $\Big[l/l\Big]_f(z)$ *existe.*

Théorème A.5 (Unitarité)**.** *Soit* $f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i\, z^i$ *une fonction unitaire :*

$$f(z)\,\Big[f(z)\Big]^{\star} = 1. \tag{A.17}$$

Si $\Big[l/l\Big] = \Big[l/l\Big]_f(z)$ *est un approximant de Padé diagonal de* $f(z)$, *alors*

$$\Big[l/l\Big]\,\Big[l/l\Big]^{\star} = 1. \tag{A.18}$$

Nous disons que les approximants de Padé diagonaux préservent l'unitarité.

Signalons, pour terminer cet annexe, qu'il est possible d'appliquer les approximants de Padé à des séries numériques. En effet, toute série numérique

$$s = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \tag{A.19}$$

peut être considérée comme la valeur de la fonction

$$s(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i\, z^i \tag{A.20}$$

au point $z = 1$.

Annexe B

Algorithme epsilon de Wynn

B.1 Introduction : Convergence des suites

Considérons la suite

$$\left\{s_n\right\} \equiv s_0\,,\, s_1\,,\, s_2\,,\, \ldots \tag{B.1}$$

qui converge vers une certaine limite s ou qui, si elle diverge, peut donner s grâce à une méthode de sommation appropriée. Dans ce dernier cas, s est appelée "*anti–limite*". Pour quantifier la vitesse de convergence de cette suite, il suffit d'étudier son comportement asymptotique. On peut écrire :

$$s_n = s + as(n) \tag{B.2}$$

en sorte que l'erreur relative que l'on commet sur s en se limitant à s_n vaut :

$$\left|\frac{s - s_n}{s}\right| = \left|\frac{as(n)}{s}\right|. \tag{B.3}$$

La connaissance du comportement asymptotique de la suite permet donc d'en estimer la convergence. S'il s'avère que la vitesse de convergence de la suite $\left\{s_n\right\}$ est faible, il peut être utile de transformer cette suite en une autre suite, $\left\{\sigma_n\right\}$ par exemple, qui tendrait plus rapidement vers la même limite ou *anti–limite* s.

Plusieurs algorithmes peuvent être utilisés pour l'accélération de la convergence d'une suite. Nous ne considérons que l'*algorithme epsilon* qui, comme nous allons le voir, permet de calculer les approximants de Padé. Cet algorithme est fortement lié à la *transformation de Shanks*.

B.2 La transformation de Shanks

Dans son article sur les transformations non–linéaires des suites, Shanks [Shanks, 1955] a considéré la suite suivante :

$$s_n = s + \sum_{j=0}^{k-1} c_j \, \Delta s_{n+j} \; ; \, n \in \mathbb{N} \; ; \tag{B.4}$$

où Δs est défini par

$$\Delta s_n = s_{n+1} - s_n. \tag{B.5}$$

Si les éléments s_n de la suite (B.4) sont les sommes partielles d'une série infinie,

$$s_n = \sum_{\nu=0}^{n} a_\nu \; , \tag{B.6}$$

cette suite peut aussi être écrite comme suit :

$$s_n = s + \sum_{j=0}^{k-1} c_j \, a_{n+j+1} \; ; n \in \mathbb{N}. \tag{B.7}$$

Cela signifie que la limite ou anti–limite s de la série infinie est approximée par la somme partielle s_n plus une somme pondérée des k termes a_{n+1} , a_{n+2} , … , a_{n+k} qui suivent immédiatement. Nous voyons que la suite (B.4) contient $k+1$ inconnues – la limite (ou anti–limite) s et les k coefficients c_0 , c_1 , … , c_{k-1} – qui toutes apparaissent linéairement. Le but de Shanks, en construisant sa transformation [Shanks, 1955], a été que celle-ci fournisse s pour la suite (B.4) et, plus généralement, pour toute suite de la forme

$$s_n = s + \sum_{j=0}^{k} c_j \lambda_j^n \; , \; n \in \mathbb{N}.$$

La transformation de Shanks est donnée sous forme d'un rapport de deux déterminants [Brezinski, 1978, Wynn, 1956] :

$$e_k\left(s_n\right) = \frac{\begin{vmatrix} s_n & s_{n+1} & \cdots & s_{n+k} \\ \Delta s_n & \Delta s_{n+1} & \cdots & \Delta s_{n+k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta s_{n+k-1} & \Delta s_{n+k} & \cdots & \Delta s_{n+2k-1} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \Delta s_n & \Delta s_{n+1} & \cdots & \Delta s_{n+k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta s_{n+k-1} & \Delta s_{n+k} & \cdots & \Delta s_{n+2k-1} \end{vmatrix}} \tag{B.8}$$

Remarquons que pour calculer la transformée $e_k(s_n)$, on a besoin d'éléments s_n , s_{n+1} , ... , s_{n+2k}, ce qui implique que $e_k(s_n)$ est une transformation d'ordre $2k$.

B.3 Transformation de Shanks et approximants de Padé

Soit $f_n(z)$ une somme partielle de la série de puissances (A.1) :

$$f_n(z) = \sum_{\nu=0}^{n} c_\nu \, z^\nu. \tag{B.9}$$

Si l'on applique la transformation de Shanks à la suite $\left\{f_n(z)\right\}$, en tenant compte de ce que

$$\Delta f_n(z) = f_{n+1}(z) - f_n(z) = c_{n+1} \, z^{n+1} \ , \tag{B.10}$$

on trouve [Shanks, 1955] que la relation (B.8) a la forme déterminante de l'approximant de Padé $\left[n+k/k\right]_f(z)$. On a donc l'identité importante :

$$e_k \left(f_n(z)\right) = \left[n+k/k\right]_f(z) \ ; \, k \, , \, n \in \mathbb{N}. \tag{B.11}$$

B.4 L'algorithme epsilon

Dû à Wynn, l'algorithme epsilon procède au calcul réculsif des quantités $e_k(s_n)$ de la transformation de Shanks définies par la relation (B.8) et, par conséquent, les approximants de Padé. Dans cet algorithme, on calcule des quantités avec deux indices $\epsilon_k^{(n)}$. Les règles de calcul de l'algorithme epsilon sont les suivantes [Baker and Graves-Morris, 1981, Brezinski, 1978] :

$$\begin{cases} \epsilon_{-1}^{(n)} = 0 \ \ , \ \epsilon_0^{(n)} = s_n \ ; \, n = 0 \, , \, 1 \, , \, 2 \, , \, \ldots \\ \\ \epsilon_{k+1}^{(n)} = \epsilon_{k-1}^{(n+1)} + \frac{1}{\epsilon_k^{(n+1)} - \epsilon_k^{(n)}} \ ; \, k \, , \, n = 0 \, , \, 1 \, , \, 2 \, , \, \ldots \end{cases} \tag{B.12}$$

On place ces quantités dans un tableau à double entrée appelé le *tableau* ϵ :

Dans ce tableau, l'indice inférieur reste constant dans une colonne tandis que l'indice supérieur reste constant dans une diagonale descendante.

La relation (B.12) relie des quantités situées aux quatre sommets d'un losange :

$\epsilon_{-1}^{(0)} = 0$							
	$\epsilon_0^{(0)} = s_0$						
$\epsilon_{-1}^{(1)} = 0$		$\epsilon_1^{(0)}$					
	$\epsilon_0^{(1)} = s_1$		$\epsilon_2^{(0)}$				
$\epsilon_{-1}^{(2)} = 0$		$\epsilon_1^{(1)}$		$\epsilon_3^{(0)}$			
	$\epsilon_0^{(2)} = s_2$		$\epsilon_2^{(1)}$		$\epsilon_4^{(0)}$		$\ddots$
$\epsilon_{-1}^{(3)} = 0$		$\epsilon_1^{(2)}$		$\epsilon_3^{(1)}$			
	$\epsilon_0^{(3)} = s_3$		$\epsilon_2^{(2)}$		$\epsilon_4^{(1)}$		$\ddots$
$\epsilon_{-1}^{(4)} = 0$		$\epsilon_1^{(3)}$		$\epsilon_3^{(2)}$			
$\vdots$	$\epsilon_0^{(4)} = s_4$	$\vdots$	$\epsilon_2^{(3)}$	$\vdots$	$\epsilon_4^{(2)}$		
	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\ddots$	

TABLEAU B.1 – Tableau ϵ

$$\begin{array}{ccccc} & & \epsilon_k^{(n)} & & \\ & \nearrow & & \searrow & \\ \epsilon_{k-1}^{(n+1)} & & & & \epsilon_{k+1}^{(n)} \\ & \searrow & & \nearrow & \\ & & \epsilon_k^{(n+1)} & & \end{array} \tag{B.13}$$

Si l'on connaît $\epsilon_{k-1}^{(n+1)}$, $\epsilon_k^{(n)}$ et $\epsilon_k^{(n+1)}$, la relation (B.12) permet de calculer $\epsilon_{k+1}^{(n)}$; c'est ce que signifient les flèches du tableau (B.13). La relation (B.12) permet donc de progresser de la gauche vers la droite et de haut en bas dans le tableau ϵ à partir des conditions initiales $\epsilon_{-1}^{(n)} = 0$ et $\epsilon_0^{(n)} = s_n$ pour $n = 0\,,\, 1\,,\, 2\,,\, \cdots$: si l'on connaît s_0 et s_1 , on peut calculer $\epsilon_1^{(0)}$; si l'on connaît s_1 et s_2 , on peut calculer $\epsilon_1^{(1)}$; à partir de $\epsilon_1^{(0)}$ et de $\epsilon_1^{(1)}$, on obtiendra ensuite $\epsilon_2^{(0)}$ et ainsi de suite.

Les détails sur l'algorithme epsilon de Wynn peuvent être trouvés dans [Weniger, 1989, Wynn, 1966].

B.5 L'algorithme epsilon et la transformation de Shanks

La propriété fondamentale de l'algorithme epsilon est celle qui le relie directement à la transformation de Shanks et, par suite, aux approximants de Padé. L'algorithme epsilon est dû à Wynn. C'est lui qui l'a relié à la transformation de Shanks. Cette liaison repose sur le théorème suivant [Wynn, 1956] :

Théorème B.1.

$$\epsilon_{2\,k}^{(n)} = e_k(s_n) \quad et \quad \epsilon_{2\,k+1}^{(n)} = \frac{1}{e_k(\Delta s_n)} \; ; \; n \, , \, k = 0 \, , \, 1 \, , \, 2 \, , \, \cdots \tag{B.14}$$

Ainsi, on voit que les colonnes paires de l'algorithme epsilon sont identiques à la transformation de Shanks. On voit aussi que les quantités d'indice inférieur impair sont les inverses des nombres obtenus en appliquant la transformation de Shanks à la suite $\left\{\Delta s_n = s_{n+1} - s_n\right\}$.

Le théorème suivant [Brezinski, 1978] établit une liaison entre l'algorithme epsilon et les approximants de Padé :

Théorème B.2. *Soit $f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \, z^i$ une série de puissances. Si pour z fixé on applique l'algorithme epsilon à la suite des sommes partielles de cette série,*

$$\epsilon_0^{(n)} = s_n = \sum_{i=0}^{n} c_i \, z^i \; , \tag{B.15}$$

alors :

$$\epsilon_{2\,k}^{(n)} = \Big[n + k/k \Big]_f (z) \; ; \; n \, , \, k = 0 \, , \, 1 \, , \, 2 \, , \, \cdots \tag{B.16}$$

Une description d'un programme FORTRAN 77 qui calcule la transformation de Shanks d'une suite donnée au moyen de l'algorithme epsilon peut être trouvée dans [Weniger, 1985].

Annexe C

Calcul analytique de la fréquence et de la période de Rabi

Pour calculer la période de Rabi, on part du calcul de $\langle\Psi_i|\hat{p}_z|\Psi_f\rangle$. Ici $\Psi_i = \Psi_{100}$ et $\Psi_f = \Psi_{210}$ qui sont respectivement donnés par les expressions :

$$\Psi_{100}(r,\theta,\phi) = R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\phi) \tag{C.1}$$

$$\Psi_{210}(r,\theta,\phi) = R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\phi) \tag{C.2}$$

En remplaçant les parties radiales et les harmoniques sphériques par leurs valeurs nous obtenons :

$$\Psi_{100}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r} \tag{C.3}$$

$$\Psi_{210}(r,\theta,\phi) = \frac{cos\theta}{4\sqrt{2\pi}}re^{-\frac{r}{2}} \tag{C.4}$$

La transformation de $\langle\Psi_{100}|p_z|\Psi_{210}\rangle$ se fait de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\langle\Psi_{100}|p_z|\Psi_{210}\rangle =& \frac{E_{21}-E_{10}}{i}\langle\Psi_{100}|rcos\theta|\Psi_{210}\rangle \\ =& \frac{1}{4\pi\sqrt{2}}\frac{E_{21}-E_{10}}{i}\int_0^\infty r^4e^{-\frac{3}{2}r}dr\int_0^\pi sin\theta cos^2\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\end{aligned} \tag{C.5}$$

On calcule les différentes intégrales de l'expression (C.5)

$$\int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi \tag{C.6}$$

$$I = \int_0^\pi sin\theta cos^2\theta d\theta \tag{C.7}$$

on pose $u = cos\theta \quad du = -sin\theta d\theta$ si $\theta = 0$ $u = 1$ et si $\theta = \pi$, $u = -1$ l'équation (C.7) devient

$$I = \int_{-1}^{1} u^2 du = \frac{2}{3} \tag{C.8}$$

$$\int_0^{\infty} r^4 e^{-\frac{3}{2}r} dr = 4! \left(\frac{2}{3}\right)^5 \tag{C.9}$$

En remplaçant les expressions (C.6), (C.8) et (C.9) dans l'équation (C.5), on obtient :

$$\begin{aligned} |\langle \Psi_{100}|p_z|\Psi_{210}\rangle| =& \frac{E_{21}-E_{10}}{4\pi\sqrt{2}} \frac{24\times 32}{243} \frac{2}{3} \times 2\pi \\ =& \frac{256}{243\sqrt{2}}(E_{21}-E_{10}) \end{aligned} \tag{C.10}$$

Le calcul de A_0

$$A_0 = \frac{E_0}{\omega} = \frac{5,3378.10^{-9}\sqrt{I}}{\omega} \tag{C.11}$$

avec $I = 10^{13}\ W/cm^2$, on a :

$$A_0 = \frac{5,3378.10^{-3}\sqrt{10}}{E_{21}-E_{10}} \tag{C.12}$$

La fréquence de Rabi est donnée par la relation :

$$\begin{aligned} \Omega_R =& A_0|\langle \Psi_{100}|p_z|\Psi_{210}\rangle| \\ =& \frac{256(E_{21}-E_{10})}{243\sqrt{2}} \frac{5,3378.10^{-3}\sqrt{10}}{E_{21}-E_{10}} \\ =& \frac{256}{243\sqrt{2}} \times 5,3378.10^{-3}\sqrt{10} \\ =& 0,012574218 \end{aligned} \tag{C.13}$$

La période de Rabi est donnée par :

$$T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R} = \frac{243\sqrt{2}\times 2\pi}{5,3378\times 256.10^{-3}\sqrt{10}} = 499,687957309 \tag{C.14}$$

Pour $I = 10^{12}\ W/cm^2$, on a :

$$A_0 = \frac{5,3378.10^{-3}}{E_{21}-E_{10}} \tag{C.15}$$

La fréquence de Rabi est donnée par la relation :

$$\begin{aligned} \Omega_R =& A_0|\langle \Psi_{100}|p_z|\Psi_{210}\rangle| \\ =& \frac{256(E_{21}-E_{10})}{243\sqrt{2}} \frac{5,3378.10^{-3}}{E_{21}-E_{10}} \\ =& \frac{256}{243\sqrt{2}} \times 5,3378.10^{-3}\sqrt{10} \\ =& 0,003976317 \end{aligned} \tag{C.16}$$

La période de Rabi est donnée par :

$$T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R} = \frac{243\sqrt{2} \times 2\pi}{5,3378 \times 256.10^{-3}} = 1580,152043522 \tag{C.17}$$

Bibliographie

[Abramowitz and Stegun, 1970] Abramowitz, M. and Stegun, I. (1970). Handbook of mathematical functions, 9th printing. *Dover Publication, New York*.

[Baker and Graves-Morris, 1981] Baker, G. A. and Graves-Morris, P. (1981). Pade approximants. part 2 : Extensions and applications. *Encyclopedia of Mathematics and its Applications*.

[Balslev and Combes, 1971] Balslev, E. and Combes, J.-M. (1971). Spectral properties of many-body schrödinger operators with dilatation-analytic interactions. *Commun. Math. Phys.*, 22(4) :280–294.

[Ben-Tal et al., 1993] Ben-Tal, N., Moiseyev, N., Kosloff, R., and Cerjan, C. (1993). Harmonic generation in ionizing systems by the time-dependent complex coordinate floquet method. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, 26(8) :1445.

[Bender and Orszag, 1999] Bender, C. M. and Orszag, S. A. (1999). *Advanced mathematical methods for scientists and engineers I : Asymptotic methods and perturbation theory*, volume 1. Springer Science & Business Media, New York.

[Bethe and Salpeter, 2012] Bethe, H. A. and Salpeter, E. E. (2012). *Quantum mechanics of one-and two-electron atoms*. Springer Science & Business Media, New York.

[Brabec and Krausz, 2000] Brabec, T. and Krausz, F. (2000). Intense few-cycle laser fields : Frontiers of nonlinear optics. *Rev. Mod. Phys.*, 72(2) :545.

[Bransden and Joachain, 2003] Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2003). *Physics of atoms and molecules*. Pearson Education, Singapore.

[Brezinski, 1978] Brezinski, C. (1978). *Algorithmes d'accélération de la convergence. Etude numérique*. Editions Technip, Paris.

[Chqondi, 2016] Chqondi, S. (2016). *Etude théorique de petits systèmes quantiques en champ laser intenses (infrarouges et/ou hautes fréquences)*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI ; Université Moulay Ismaïl (Meknès, Maroc), Paris.

[Cohen-Tannoudji et al., 1977] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., and Laloe, F. (1977). Mathematical tools in quantum mechanics. In *Quantum mechanics. Ed. Rev., Amend, Paris*.

[Cormier and Lambropoulos, 1996] Cormier, E. and Lambropoulos, P. (1996). Optimal gauge and gauge invariance in non-perturbative time-dependent calculation of above-threshold ionization. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, 29(9) :1667.

[Courant and Hilbert, 2008] Courant, R. and Hilbert, D. (2008). *Methods of mathematical physics : partial differential equations*. John Wiley & Sons : New York.

[de Bohan, 2001] de Bohan, A. (2001). *Dynamique de l'interaction laser-atome : moment canonique et approximation du champ fort*. Thèse de doctorat, Université Catholique de Louvain, Louvain.

[Delande et al., 1991] Delande, D., Bommier, A., and Gay, J. (1991). Positive-energy spectrum of the hydrogen atom in a magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 66(2) :141.

[Einstein, 1905] Einstein, A. (1905). On a heurestic point of view concerning the production and transformation of light. *Ann. Phys.*, 17 :132–148.

[Fatunla, 1978] Fatunla, S. O. (1978). An implicit two-point numerical integration formula for linear and nonlinear stiff systems of ordinary differential equations. *Math. Comp.*, 32(141) :1–11.

[Fatunla, 1980] Fatunla, S. O. (1980). Numerical integrators for stiff and highly oscillatory differential equations. *Math. Comp.*, 34(150) :373–390.

[Frapiccini et al., 2014] Frapiccini, A. L., Hamido, A., Schröter, S., Pyke, D., Mota-Furtado, F., O'Mahony, P. F., Madronero, J., Eiglsperger, J., and Piraux, B. (2014). Explicit schemes for time propagating many-body wave functions. *Phys. Rev. A*, 89(2) :023418.

[Giraud, 2005] Giraud, S. (2005). *Dynamique de l'ionisation de l'atome d'hydrogène par une impulsion laser*. Université Catholique de Louvain, Louvain.

[Gradshteyn and Ryzhik, 1994] Gradshteyn, I. and Ryzhik, I. (1994). *Table of Integrals, Series, and Products 5th edn, ed Alan Jeffry (San Diego, CA : Academic)*.

[Gradshteyn, 1994] Gradshteyn, R. (1994). *Tables of Integrals, Series and Products*. Academic Press, New York.

[Grosges, 1999] Grosges, T. (1999). *La parallélisation d'une méthode itérative pour la résolution d'un problème aux valeurs propres est intéressante, aussi bien sur un ordinateur à mémoire distribuée que sur un ordinateur à mémoire partagée*. Thèse de doctorat, Université Catholique de Louvain, Louvain.

[Guichard, 2007] Guichard, R. (2007). *Excitation et ionisation des atomes d'hydrogène et d'hélium par des impulsions laser femtosecondes : approche théorique par des états de" Coulomb-Volkov"*. Thèse de doctorat, Université Sciences et Technologies-Bordeaux I, Bordeaux.

[Herbst, 1996] Herbst, E. (1996). Atomic, molecular, & optical physics handbook, ed. *GW F. Drake, AIP, Woodbury, NY*, pages 429–440.

[Huens, 1996] Huens, E. (1996). *Interaction de l'hydrogène atomique avec une impulsion laser courte et intense : développement d'une méthode numérique d'analyse et application à l'étude de la stabilisation.* Thèse de doctorat, Université Catholique de Louvain, Louvain.

[Jedrzejewski, 2005] Jedrzejewski, F. (2005). *Introduction aux méthodes numériques.* Springer Science & Business Media, Berlin.

[Kukulin et al., 1989] Kukulin, V., Krasnopol'sky, V., and Horáček, J. (1989). S-matrix parametrization of scattering data. extraction of resonance parameters from experimental data. *Theory of Resonances : Principles and Applications, New York*, pages 276–301.

[Madroñero and Piraux, 2009] Madroñero, J. and Piraux, B. (2009). Explicit time-propagation method to treat the dynamics of driven complex systems. *Phys. Rev. A*, 80(3) :033409.

[Mitchel, 1978] Mitchel, W. (1978). *Atoms and Molecules.* Academic Press, New York.

[Mittleman, 1982] Mittleman, M. H. (1982). States of an atom in a laser. In *Introduction to the Theory of Laser-Atom Interactions*, pages 31–45. Springer, Boston.

[NYENGERI, 2005] NYENGERI, H. (2005). *Dynamique de l'ionisaton de l'atome d'hydrogène exposé à un champ laser intense : utilisation des bases complexes.* Mémoire de DEA, Université Catholique de Louvain, Louvain.

[Nyengeri, 2009] Nyengeri, H. (2009). *Méthodologie des interactions laser-atomes : Application a l'ionisation simple quazi-résonante de l'hélium à trois photons.* Thèse de doctorat, Université Catholique de Louvain, Louvain.

[Piraux and Shakeshaft, 1994] Piraux, B. and Shakeshaft, R. (1994). Norm of the wave function on a complex basis. *Phys. Rev. A*, 49(5) :3903.

[Pont et al., 1991] Pont, M., Proulx, D., and Shakeshaft, R. (1991). Numerical integration of the time-dependent schrödinger equation for an atom in a radiation field. *Phys. Rev. A*, 44(7) :4486.

[Reed and Simon, 1978] Reed, M. and Simon, B. (1978). *IV : Analysis of Operators*, volume 4. Academic press, San Francisco.

[Reinhardt, 1982] Reinhardt, W. P. (1982). Complex coordinates in the theory of atomic and molecular structure and dynamics. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 33(1) :223–255.

[Rotenberg, 1962] Rotenberg, M. (1962). Application of sturmian functions to the schrödinger three-body problem : Elastic e^+−H scattering. *Ann. Phys.*, 19(2) :262–278.

[Rotenberg, 1970] Rotenberg, M. (1970). Theory and application of sturmian functions. In *Advances in Atomic and Molecular Physics*, volume 6, pages 233–268. Academic press, New York.

[SAIDI, 2017] SAIDI, A. (2017). *Solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour un potentiel non central avec de plus un potentiel coulombien et un potentiel quadratique inverse.* Thèse de docotorat, Université Mohamed BOUDIAF de M'Sila, M'Sila.

[Schrödinger, 1926] Schrödinger, E. (1926). The non-relativistic equation of the de broglie waves. *Ann. der Phys*, 79 :361–489.

[SERAICHE, 2018] SERAICHE, F. (2018). *La solution exacte de l'équation de Schrödinger stationnaire et non stationnaire pour le potentiel hyperbolique.* Thèse de doctorat, Université Mohamed BOUDIAF de M'Sila, M'sila.

[Shanks, 1955] Shanks, D. (1955). Non-linear transformations of divergent and slowly convergent sequences. *J. Math. Phys.*, 34(1-4) :1–42.

[van der Houwen, 1982] van der Houwen, P. (1982). On the time integration of parabolic differential equations. In *Numerical Analysis*, pages 157–168. Springer, Amsterdam.

[Wassaf, 2002] Wassaf, J. (2002). *Théorie de l'ionisation des atomes en champ laser intense : étude des structures observées aux hautes énergies.* Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, Paris.

[Weniger, 1985] Weniger, E. J. (1985). Weakly convergent expansions of a plane wave and their use in fourier integrals. *J. Math. Phys.*, 26(2) :276–291.

[Weniger, 1989] Weniger, E. J. (1989). Nonlinear sequence transformations for the acceleration of convergence and the summation of divergent series. *Comput. Phys. Rep.*, 10(5-6) :189–371.

[Wynn, 1956] Wynn, P. (1956). On a device for computing the e\sbm(s\sbn) tranformation. *Math. Tables Aids Comput.*, 10 :91.

[Wynn, 1966] Wynn, P. (1966). On the convergence and stability of the epsilon algorithm. *SIAM J. Numer. Anal.*, 3(1) :91–122.

[Yamani and Reinhardt, 1975] Yamani, H. A. and Reinhardt, W. P. (1975). L 2 discretizations of the continuum : Radial kinetic energy and coulomb hamiltonian. *Phys. Rev. A*, 11(4) :1144.

[Yamazaki and Wu, 2011] Yamazaki, I. and Wu, K. (2011). A communication-avoiding thick-restart lanczos method on a distributed-memory system. In *European Conference on Parallel Processing*, pages 345–354. Springer, Berlin Heidelberg.

[Zettili, 2003] Zettili, N. (2003). *Quantum mechanics : concepts and applications.* American Association of Physics Teachers, Washington DC.