

NOTES DES MEMBRES ET CORRESPONDANTS ET NOTES PRÉSENTÉES OU TRANSMISES PAR LEURS SOINS

PHYSIQUE THÉORIQUE. — *Sur la résolution numérique de certains systèmes d'équations intégral-différentielles de la mécanique quantique.* Note (*) de **Mme NICOLE FEAUTRIER**, **MM. PAUL FEAUTRIER** et **Vo Ky LAN**, présentée par M. André Lallemend.

On donne une méthode de résolution numérique des systèmes d'équations intégral-différentielles du second ordre avec conditions aux limites. Elle est particulièrement adaptée aux problèmes de diffusions en mécanique quantique.

1. Certaines méthodes approximatives de la mécanique quantique conduisent à la résolution de systèmes d'équations du type

$$(1) \quad \frac{d^2}{dr^2} F_i(r) = \sum_j V_{ij} F_j(r) \pm \sum_j \int_0^a G_{ij}(r, r') F_j(r') dr'.$$

Les $F_i(r)$ sont les fonctions d'onde inconnues; les V_{ij} sont les potentiels directs et les $G_{ij}(r, r')$ les potentiels d'échanges qui satisfont à

$$V_{ij}(r) = V_{ji}(r); \quad G_{ij}(r, r') = G_{ji}(r', r).$$

En général, chaque G_{ij} est la fonction de Green d'une équation différentielle que nous écrivons : $D_{ij}y = 0$, où D_{ij} est un opérateur différentiel du second ordre dont les coefficients sont fonction de r .

Les inconnues auxiliaires $g_{ij} = \int_0^a G_{ij}(r, r') F_j(r') dr'$ satisfont donc aux équations différentielles

$$D_{ij}g_{ij} = F_j(r)$$

et le système intégral-différentiel (1) peut être remplacé par le système différentiel :

$$(2) \quad \begin{cases} \frac{d^2}{dr^2} F_i = \sum_j V_{ij}(r) F_j(r) + \sum_j g_{ij}, \\ D_{ij}g_{ij} = F_j(r). \end{cases}$$

Le choix des inconnues auxiliaires g_{ij} est dans une large mesure arbitraire et peut être modifié de manière à simplifier au maximum la résolution du système (2). En pratique, cette résolution est la plus facile quand les opérateurs D_{ij} ne font pas intervenir de dérivées premières.

Par exemple, nous avons étudié la diffusion élastique des électrons lents par le lithium par une méthode de potentiel de polarisation. En négligeant certains termes d'échange, on est conduit à résoudre l'équation ⁽¹⁾ :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k_0^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] F(r) = V(r) F(r) + P_2(r) \frac{2}{2l+1} \int_0^\infty \gamma(r, r') P_2(r') F(r') dr',$$

avec

$$\gamma(r, r') = \begin{cases} \frac{r^l}{r'^{l+1}} & \text{si } r' > r, \\ \frac{r'^l}{r^{l+1}} & \text{si } r' < r, \end{cases}$$

$r \gamma(r, r')$ est la fonction de Green de l'équation

$$\frac{d^2 y}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} y = 0$$

et, par conséquent, l'inconnue auxiliaire

$$g(r) = r \int_0^\infty \gamma(r, r') P_2(r') F(r') dr'$$

satisfait à l'équation différentielle

$$\frac{d^2 g}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} g = - \frac{2l+1}{r} P_2(r) F(r).$$

2. Les conditions aux limites auxquelles doivent satisfaire les solutions du système (2) dépendent du problème étudié; elles diffèrent en particulier suivant que l'on étudie un état lié ou un état de diffusion. Cependant elles sont toujours de la forme :

$$f_l(0) = 0; \quad g_{lj}(0) = a_{lj};$$

$f_l(r) \rightarrow 0$ quand $r \rightarrow \infty$ pour un état lié; $g_{lj}(r) \rightarrow \beta_{lj}$ quand $r \rightarrow \infty$;
 $f_l(r) \sim A_l \sin(kr + \delta_l)$ quand $r \rightarrow \infty$ pour un état de diffusion.

3. La méthode numérique la mieux adaptée à ces systèmes lorsque les conditions sont imposées aux fonctions inconnues aux deux extrémités de l'intervalle de variation est la méthode de Fox-Goodwin ⁽²⁾.

Si, en notation matricielle, le système à résoudre est

$$(3) \quad \frac{d^2 \vec{Y}}{dr^2} = U(r) \vec{Y} + \vec{V}(r),$$

avec les conditions $\vec{Y}(r_0) = \vec{Y}_0$; $\vec{Y}(r_N) = \vec{Y}_N$; on introduit une subdivision de l'intervalle (r_0, r_N) , soit $\{r_i\}$, $i = 0, N$ et la formule de dérivation approchée

$$\left(\frac{d^2 \vec{Y}}{dr^2} \right)_{r=r_i} = \alpha_i \vec{Y}_{i+1} - (\alpha_i + \beta_i) \vec{Y}_i + \beta_i \vec{Y}_{i-1},$$

avec

$$\vec{Y}_i = \vec{Y}(r_i); \quad \alpha_i = \frac{1}{(r_{i+1} - r_i)(r_{i+1} - r_{i-1})}; \quad \beta_i = \frac{1}{(r_i - r_{i-1})(r_{i+1} - r_{i-1})}.$$

Le système différentiel (3) est alors approximativement remplacé par un système d'équations linéaires :

$$(4) \quad \alpha_i \vec{Y}_{i+1} - [\alpha_i + \beta_i + U(r_i)] \vec{Y}_i + \beta_i \vec{Y}_{i-1} = \vec{V}(r_i)$$

que l'on résoud par la méthode de Gauss à l'aide des formules de récurrence :

$$R_i = (\alpha_i + \beta_i + U(r_i) - \beta_i R_{i-1})^{-1} \alpha_i,$$

$$\vec{W}_i = (\alpha_i + \beta_i + U(r_i) - \beta_i R_{i-1})^{-1} (\beta_i \vec{W}_{i-1} - \vec{V}(r_i)),$$

$$\vec{Y}_i = R_i \vec{Y}_{i+1} + \vec{W}_i,$$

avec les conditions initiales $R_n = 0$; $\vec{W}_n = \vec{y}_n$.

4. CONCLUSION. — Nous avons appliqué cette méthode au problème de la diffusion des électrons lents par des atomes ou des ions en utilisant l'approximation des « orbitales polarisées ». Nous calculons de cette manière la fonction d'onde perturbée de l'atome et il n'y a aucun ajustage à faire comme dans certaines autres méthodes. Nous calculons aussi les fonctions d'onde de l'électron libre, donc les sections efficaces (*). Cette méthode non itérative ne nécessite aucun développement à l'origine. D'autre part, elle est particulièrement stable à l'infini, ce qui la rend très intéressante dans les problèmes de diffusion. Nous l'avons aussi utilisé avec succès pour la résolution des équations couplées (close-coupling).

(*) Séance du 20 mai 1968.

(1) N. FEAUTRIER et Vo KY LAN, *Comptes rendus*, 267, série B, 1968 (à paraître).

(2) L. FOX, *The numerical solution of two-point boundary problems in ordinary differential equations*, Clarendon Press, Oxford, 1957.

(3) P. M. STONE, *Phys. Rev.*, 141, 1966, p. 137.

(Observatoire de Paris-Meudon,
place Janssen, Meudon, Hauts-de-Seine.)