



## AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

Mr **AMILA Ibrahim**

Soutiendra : le **Lundi 17/02/2025 à 10H00**

Lieu : **FSDM – Centre Visioconférence**

Une thèse intitulée :

**«Contribution à l'étude de quelques système quantiques et applications aux molécules diatomiques »**

En vue d'obtenir le **Doctorat**

FD : **Sciences des Matériaux et Procédés Industriels**

Spécialité : **Sciences des Matériaux pour l'énergie et l'environnement**

Devant le jury composé comme suit :

Nom et prénom	Etablissement	Grade	Qualité
FILALI Mohammed	Faculté des sciences, Dhar El Mahraz, Fès	PES	Président
RAHMANI Khalid	Ecole Normale Supérieure, Rabat	PES	Rapporteur & examinateur
EL ALLATI Abderrahim	Faculté des Sciences et Techniques, Al Hoceima	MCH	Rapporteur & examinateur
SALI Ahmed	Faculté des sciences, Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Rapporteur & examinateur
NAJI Mohamed	Faculté des sciences, Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Examinateur
LEMZIOUKA Hamane	Faculté des sciences, Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Examinateur
FEDOUL Abdelaziz	Faculté des sciences, Dhar El Mahraz, Fès	PES	Invité
CHATWITI Abdelhafid	Faculté des sciences, Dhar El Mahraz, Fès	PES	Invité
SAYOURI Salaheddine	Faculté des sciences, Dhar El Mahraz, Fès	PES	Invité
ABABOU Yahya	Faculté des sciences, Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse



## Résumé :

Dans notre étude, nous appliquons une méthode analytique alternative, pour résoudre l'équation de Schrödinger, dans le cas du potentiel anharmonique polynomial afin d'obtenir les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes, jusqu'à la correction au second ordre. Notre approche est basée sur le théorème de Floquet et la méthode des moyennes résonnantes, c'est une méthode directe non-perturbative. Par la suite, les formules analytiques établies sont utilisées dans le cas du potentiel de Morse. Ce potentiel est écrit par le développement de la série de Taylor jusqu'au sixième ordre ; et conduit à exprimer les spectres d'énergie vibrationnelle des molécules diatomiques. Pour illustrer nos formules analytiques, nous avons effectué des calculs du spectre d'énergie, ainsi que du nombre quantique maximal correspondant à l'énergie de dissociation ; en outre, nous avons calculé les constantes spectroscopiques, en fonction des paramètres du potentiel de Morse, pour différents exemples de molécules diatomiques. Notons que, les comparaisons de nos valeurs numériques, avec ceux disponibles dans la littérature sont en bon accord, ce qui prouve que les formules obtenues par notre méthode sont fiables et peuvent aider à la vérification des résultats des expériences spectroscopiques.

## Mots clés :

Anharmonique ; Niveaux d'énergies ; Fonction d'onde ; Equation de Schrödinger ; Théorème de Floquet ; Potentiel de Morse ; Molécule Diatomique.



## CONTRIBUTION TO THE STUDY OF SOME QUANTUM SYSTEMS AND APPLICATIONS TO DIATOMIC MOLECULES

### Abstract:

In our study, we apply an alternative analytical method, by solving the Schrödinger equation, for the polynomial anharmonic potential in order to obtain the energy levels and the corresponding wave functions, up to second order correction. Our approach based on the Floquet theorem and the resonating averages method, it is a direct non-perturbative method. Afterwards, the analytical established formulas are using in the case of the Morse potential. This potential written by the Taylor development series up to the sixth orders; and leads to expressing the vibrational energy spectra of diatomic molecules. To illustrate our analytical formulas, we performed calculations of the energy spectrum, as well as the maximum quantum number corresponding to the dissociation energy; moreover, we calculated the spectroscopic constants, according to the parameters of the Morse potential, for different examples of diatomic molecules. We note that, the comparisons of our numerical values with those available in the literature are in good agreement, which proves that the formulas obtained by our method are reliable and can help in the verification of the results of spectroscopic experiments.

### Key Words:

Anharmonic; Energy Levels; Wave Function; Schrödinger Equation; Floquet Theorem; Morse Potential; Diatomic Molecule